ISSN0386-8257

臨時別冊・数理科学

SGCライブラリ
102

For Senior & Graduate Courses

量子力学ノート

数理と量子技術

◆

佐藤 文隆 著



サイエンス社

SGC ライブラリ-102

量子力学ノート

数理と量子技術

佐藤 文隆　著

サイエンス社

SGC ライブラリ（The Library for Senior & Graduate Courses）

近年，特に大学理工系の大学院の充実はめざましいものがあります．しかしながら学部上級課程並びに大学院課程の学術的テキスト・参考書はきわめて少ないのが現状であります．本ライブラリはこれらの状況を踏まえ，広く研究者をも対象とし，**数理科学諸分野および諸分野の相互に関連する領域から**，現代的テーマやトピックスを順次とりあげ，時代の要請に応える魅力的なライブラリを構築してゆこうとするものです．装丁の色調は，

数学・応用数理・統計系（黄緑），**物理学系**（黄色），**情報科学系**（桃色），
脳科学・生命科学系（橙色），**数理工学系**（紫），**経済学等社会科学系**（水色）

と大別し，漸次各分野の今日的主要テーマの網羅・集成をはかってまいります．

※ SGC1～49 省略（品切含）

50　確率的情報処理と統計力学
田中和之編著　本体 1857 円

51　超対称性理論
太田信義・坂井典佑 共著　本体 1819 円

53　ゲノム進化を考える
斎藤成也著　本体 1429 円

55　超幾何関数入門
木村弘信著　本体 1857 円

56　相対性理論
三尾典克著　本体 1838 円

57　3 次元トポロジーの新展開
戸田正人著　本体 1867 円

58　数理・情報系のための整数論講義
木田雅成著　本体 1876 円

59　コンピュータ将棋の頭脳
小谷善行著　本体 1429 円

60　計算神経科学への招待
銅谷賢治著　本体 1429 円

61　演習くり込み群
柏太郎著　本体 1886 円

62　熱方程式で学ぶ逆問題
山本昌宏・金成煥 共著　本体 1429 円

63　重力理論講義
前田恵一著　本体 1886 円

64　代数幾何入門講義
小林正典著　本体 1876 円

65　ネットワーク科学への招待
青山・相馬・藤原 共編著　本体 1886 円

67　量子暗号理論の展開
小芦雅斗・小柴健史 共著　本体 1838 円

68　量子力学の考え方
根本香絵著　本体 1829 円

69　量子コンピュータの基礎［第 2 版］
細谷暁夫著　本体 1876 円

70　重点解説 基礎微分幾何
塩谷隆著　本体 1886 円

71　ε-δ 論法再入門
中神祥臣著　本体 1857 円

72　超関数・フーリエ変換入門
磯崎洋著　本体 1857 円

73　問題例で深める物理
香取眞理・中野徹 共著　本体 1981 円

74　非線形現象と微分方程式
小川知之著　本体 1781 円

75　数物系のための圏論
梶浦宏成著　本体 2143 円

76　超弦理論を学ぶための場の量子論
鈴木久男著　本体 2095 円

77　重点解説 ジョルダン標準形
西山享著　本体 1905 円

78　重点解説 ベクトル・テンソル
森川雅博著　本体 2095 円

79　行列解析の基礎
山本哲朗著　本体 2190 円

80　超弦理論の基礎
今村洋介著　本体 2429 円

81　繰りこみ群の物理と数理
伊東恵一著　本体 2190 円

82　超重力理論
谷井義彰著　本体 2381 円

83　共形場理論
伊藤克司著　本体 2238 円

84　演習形式で学ぶ相転移・臨界現象
宮下精二・轟木義一 共著　本体 2476 円

85　実例で学ぶ精度保証付き数値計算
中尾充宏・渡部善隆 共著　本体 2362 円

86　リーマン予想の数理物理
黒川信重・小山信也 共著　本体 2190 円

87　量子多体系の物理
藤本聡・川上則雄 共著　本体 2190 円

88　演習形式で学ぶリー群・リー環
示野信一著　本体 2381 円

89　弦理論の代数的基礎
髙橋篤史著　本体 2476 円

90　アインシュタイン方程式
白水徹也著　本体 2238 円

91　CP 対称性の破れ
林青司著　本体 2476 円

92　弦の場の理論
石橋延幸・村上公一 共著　本体 2429 円

93　超弦理論の応用
夏梅誠著　本体 2495 円

94　複素多様体論講義
辻元著　本体 2362 円

95　幾何学の量子化
前田吉昭・佐古彰史 共著　本体 2429 円

96　量子力学から超対称性へ
坂本眞人著　本体 2476 円

97　行列解析ノート
山本哲朗著　本体 2000 円

98　無限量子系の物理と数理
小嶋泉・岡村和弥 共著　本体 2381 円

99　現代宇宙論講義
辻川信二著　本体 2476 円

100　クォーク・ハドロン物理学入門
国広悌二著　本体 2238 円

101　統計力学から理解する超伝導理論
北孝文著　本体 2457 円

102　量子力学ノート
佐藤文隆著　本体 2238 円

はじめに

この本の読者対象

本書は，学部の講義などにより量子力学を学習して，どこか量子力学に不思議さを感じた人たちを念頭においている.「シュレディンガーの方程式を解いて水素原子のエネルギー準位が計算できる」という実感はあるが,「一個の粒子が二つのスリットを同時に通過する」には実感が持てずにもやもやしている人たちである．挑戦する意欲のある学部学生，大学院生，研究者それに量子力学の講義者向けのものである．量子力学の初回の入門書ではない.

「講義を受けて量子力学を一応マスターした人」や「量子力学を使った研究分野で仕事をしている人」を読者に想定するといっても，特殊な分野や数学的厳密さに進むものでなく，入門時と同じ題材をなぞっていくので基礎科目である量子力学全般の「学び直し」になることを期待している.

この本の使い方

ハウツーもの的に言うと本書の特徴は「数理ツールで量子力学を学び直す」である．量子力学を「ハイテク・インフラで」や「実験で」学ぶ新教科書があってもいいと思うが，新時代ぶりを実感するにも量子力学特有の数理ツールの習熟は必須である．現象を語る言語だからである.

本書の構成は次のようである.

1. 序章　第 1 章～第 4 章
2. 基礎　第 5 章～第 11 章
3. 展開　第 12 章～第 15 章

「序章」は少し特殊な位置づけになっていて，標準的な教科書の構成は第 5 章から始まる.「序章」は「すでにマスターした」という人たちに本書の問題意識を共有して貰うためのものである．特に第 2 章は量子力学のイメージソングともいえる「ヤングの干渉実験」を「エンタングル効果」だという解釈を提示して常識的な「波動関数の干渉効果」を否定する．また第 3 章と第 4 章では量子力学の特異性を考察する際に必要な解析力学の視点について理解を深める.

「基礎」は教科書的な入門編なので．ここから入って,「序章」,「展開」と進む読み方もある．目次をみると気づかれるように,「展開」には従来の教科書にない新しい題材を扱っており，これが教科書としての本書の特徴の一つである．核心のみを数理的に簡潔に記述しているが，それらが意味する豊富な内容はインターネット上の情報等で広めることができるだろう.

この本の目的

本書は次のような二重の目的を持っている.

1. 「アインシュタインを悩ました不思議」解明

2.「量子技術の新展開」序説

第一の目的を意識したので「序章」から始めた．アインシュタインと量子力学の関係については幾つかのコラムで述べた．しかし80年以上も「不思議」だけを見つめる謎解きは不健康である．近年のテクノロジーの進展で見えてきた量子力学の新局面を通して逆照射してみる視点が大事である．それが本書の第二の目的である．第一の「アインシュタインの悩み」が気になる人も第二の「量子技術の新展開」で量子力学の新イメージを身につけた上で立ち戻るべきであろう．

この本のスタイル

「基礎」は系統的で「ていねい」な記述に努力したが，他は，さまざまな意図をもった読者を想定しているので,「ていねい」というよりは「行間を読め！」というスタイルを取っていて，速いスピードで展開する．また，本書での説明がなく，やや高級な概念も無造作に登場する．今後の勉強の刺激と受け取っていただきたい．

本書を執筆した経緯等については「あとがき」で触れるが，量子力学が半世紀の雌伏を経て1980年頃から新たな歩みを始めたことが執筆の動機である.「学び直し」の読者にその雰囲気の一端を味わっていただきたい．

2013年9月

佐藤文隆

目　次

第 1 章
量子力学と波動性

古典力学には粒子運動と波動の二つのテーマがあり，各々，運動方程式と波動方程式で扱われる．数理的な扱いは大きく違うが，物理的には波動は粒子多体系の極限である連続体の力学として粒子の力学に還元できる．場自体がモノである電磁場でも数理的には連続体の力学である．

一方，量子力学では粒子の力学もシュレディンガーの波動関数で記述されるとして，俄に，波動一元的なイメージになるが，これは，第 5 章以下で述べるような状態ベクトルによる量子力学の理解の妨げとなる．ここでは粒子の量子力学の波動方程式と連続体の波動方程式の差に気づき，あわせて，波動に特有な干渉効果について振り返っておく．

1.1　量子力学の方程式

1.1.1　シュレディンガーの波動方程式

多くの教科書で，量子力学の基本はシュレディンガーの波動関数方程式であるとされている．この方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q},\ q\right)\Psi \tag{1.1}$$

であり，Ψ はシュレディンガーの波動関数である．右辺のハミルトニアン $\hat{H}$ は取り扱う対象の物理法則で決まっており，1 粒子の一次元運動では，古典力学のハミルトニアン

$$H(p,q)=\frac{1}{2m}p^2+V(q) \tag{1.2}$$

において，位置変数 q に正準共役な運動量 p を

$$p\rightarrow\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q} \tag{1.3}$$

と置き換えて，H をオペレータ $\hat{H}$ に変えたものである．ここで，変数 q,p は

数字ではなくオペレータ（作用素，演算子）であり，

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar \tag{1.4}$$

のように，積が可換でない．左辺の形は交換関係と呼ばれ，右辺の $\hbar(= 1.05457266 \times 10^{-36}\mathrm{Js})$ はプランク定数である．

粒子の一次元運動のシュレディンガー方程式は次のようになる．

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial q^2} + V(q)\Psi. \tag{1.5}$$

何故，これが「波動」の方程式と呼ばれるかを知るには，まず，古典力学への理解を深める必要がある．

1.1.2 物体運動の方程式

物体運動を論ずる際の理想化された粒子像は大きさのない質点だから，その状態は位置 q と速度 $\dot{q}$ で完全に表される．$\dot{q}$ と書くと，先に $q(t)$ という粒子運動の軌跡があって，それを時間で微分した接線 $\dot{q} = dq/dt$ に見えて，q から独立でない印象を与える．(derivative とは "派生したもの" の意味.) そこで解析力学では，q と独立な運動量 p が導入され，粒子の状態は (p, q) を座標とする位相空間（或いは相空間，phase space）の一点で表される．このような空間を状態空間という．

シュレディンガー方程式においては，対象の物理法則はハミルトニアン $\hat{H}$ として表されなければならない．すなわち，古典力学の基本的原理と見なされている

$$[質量] \times [加速度] = [力]$$

というニュートンの運動方程式は量子力学への橋渡しではないことに気づく．ハミルトニアンも位相空間もニュートンの運動方程式を別の形に定式化した解析力学の概念であり，位相空間の軌跡を導く関数としてハミルトニアンがある．量子力学はこの解析力学を経由して誕生しており，古典力学の見方を解析力学の見方に徹底的に改訂しておく必要がある．これについては第 3 章と第 4 章で概説する．

量子力学に不満を表明していたアインシュタインは「量子力学には加速度がない」，すなわち「力がない」と評しているが，解析力学でも既に「加速度と力」は基本概念から欠落している．したがって，高校物理学の主題である「力が働いて運動が変わる」という力を因果関係の動因と見なす視点は量子力学には受け継がれていない．

p と q で表される状態の時間的推移は次の正準方程式で与えられる．

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q}, \quad \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H(q,p)}{\partial p}. \tag{1.6}$$

ここでハミルトニアン $H(q,p)$ は位相空間上の関数であるが，その偏微分が各点で一義的に決まっているなら，ある時刻の状態の過去にも未来にも確定的に繋がっている．そうでない点は特異点と呼ばれる．三次元物理空間の一個の粒子の位置座標 q は三個であるから，N 個粒子の多体系では q の数は $3N$ 個となり，位相空間は $6N$ 次元空間となる．

1.1.3 波動方程式

波動は三次元実空間に広がって存在する媒質を想定し，その中の各点 (x,y,z) での媒質の運動状態を表す変数 ϕ が導入される．粒子運動では移動する粒子が所持する状態量 (p,q) を扱うのと違って，波動の変数 ϕ では各場所に停まり続ける変数である．場所の目印 (x,y,z) として $\phi(x,y,z)$ と書く．そして，それらがみな時間的にも変動するから $\phi(x,y,z,t)$ と書き表される．するとここで変数を区別する添字としての x,y,z と t は別物であったということが見えにくくなる．だから，A 粒子の変数を $q_A(t)$ や $p_A(t)$ と添字で表す流儀でいえば，媒質の運動状態を表す変数は $\phi_{x,y,z}(t)$ のように書くのが適当なのである．あるいは逆に粒子の変数を媒質流で書けば $q(A,t)$ となる．

結合多粒子系の粒子間距離をゼロに持っていく極限として波動方程式が導かれることを簡単な例で見てみる．互いに弾性バネで結ばれて直線上に並んだ質点系を考える．いま i 番目の粒子の位置を $q_i(t)$ と書けば，自然長で並んだ平衡状態では $q_i = id$ である．そして，一般の状態での位置座標は $q_i(t) = id + A_i(t)$ と書ける．$A_i(t)$ は平衡状態からのずれの大きさである．

運動方程式は粒子の位置座標を用いて

$$m\ddot{q}_i = -\kappa[q_i - q_{i-1}] + \kappa[q_{i+1} - q_i] \tag{1.7}$$

であるが，これはずれ $A_i(t)$ に関する方程式

$$m\ddot{A}_i = -\kappa[A_i - A_{i-1}] + \kappa[A_{i+1} - A_i] \tag{1.8}$$

に書き直される．ここで，間隔 $d \to 0$ の極限を考える．

$$-\kappa d \frac{A_i - A_{i-1}}{d} + \kappa d \frac{A_{i+1} - A_i}{d} \tag{1.9}$$

$$\to -\kappa d \left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_{x=id} + \kappa d \left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_{x=(i+1)d} \to \kappa d^2 \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}\right)_{x=id}. \tag{1.10}$$

断面積を S として，密度 ρ，弾性係数 E，$m/(Ad) \to \rho$，$(\kappa d)/S \to E$ を導入すると，$\kappa d^2/m \to E/\rho = C^2$ となり，ここで C は音速である．これらを使うと，ずれに関する方程式 (1.8) は次のような波動方程式となる．

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - C^2 \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = 0. \tag{1.11}$$

ここで大事なのは $id \to x$ のように，x は定位置を表し，そこのずれという量

が $A(x,t)$ なのである．だから x は $A_x(t)$ のように添字と見なされる．一方，x と t を同等のものと見なす立場では $A(x,t)$ は場と呼ばれる．波動方程式には空間微分があるので．粒子の力学と異質に見えるが，これは，各点の $A_i(t)$ が独立でなく隣接点の $A_{i-1}(t)$ や $A_{i+1}(t)$ に依存することを意味している．$d \to 0$ の極限でこの隣接点間の作用が空間微分の表記となったのである．(1.11) 式の形は「加速度 $\ddot{A}$ が隣接点からの作用で決まる」と解することもできる．

(1.11) 式の波動方程式は [質量]×[加速度]=[力] というニュートン運動方程式に相当するものであり，解析力学流の基本であるハミルトニアンに基づくものではない．場の力学の解析力学への改訂で必要になる運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V についてまとめておく．

$$T = \sum_i \frac{1}{2} m \left(\frac{dA_i}{dt} \right)^2, V = \sum_i \frac{1}{2} \kappa (A_i - A_{i+1})^2. \tag{1.12}$$

前に述べた $d \to 0$ の極限を取る．$A_x(t) \to \phi(x,t)$ とし，また和を積分に置き換えて，

$$T = \rho S \int \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 dx, V = \rho S \int \frac{1}{2} C^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 dx. \tag{1.13}$$

この T や V をもとに波動方程式を導き出す過程は 3.1.4 節に記す．

粒子というモノに相当するのは場 ϕ であり，場が示す典型的なコトが波動である．したがって波動方程式は場の運動方程式とも呼ばれる．場 ϕ が受ける作用は近接作用に限られ，C は近接作用の大きさを表している．

1.1.4 電磁場の運動方程式

古典電磁場の力学はマックスウェル方程式

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0},\ \nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \tag{1.14}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t},\quad \nabla \times \boldsymbol{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{j}}{c^2 \epsilon_0} \tag{1.15}$$

で記述される．電場 $\boldsymbol{E}$，磁場 $\boldsymbol{B}$ は p, q に当たる力学変数ではない．p, q に相当する場の変数は次の関係にある電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A}, U$ である．

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \nabla U. \tag{1.16}$$

真空中 ($\rho = 0,\ \boldsymbol{j} = 0$) の電磁波を考えると (1.14) より横波であることが分かり，進行方向を z 方向として，$\boldsymbol{A}(0, A(z,t), 0)$，$U = 0$ のように一つの成分を取れば，マックスウェル方程式は (1.11) 式と同じ波動方程式

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} = 0,\quad c \text{ は光速} \tag{1.17}$$

となり，その解から $B_x = -\partial A/\partial z$, $E_y = -\partial A/\partial t$ と電磁場が導かれる．

粒子の力学との対応で言うと，四元ベクトル場 $(\boldsymbol{A}, U)$ が位置を表す変数 q に対応する．そして，例えば，A の代わりに $A' = A + \nabla\phi(x, y, z)$ を取っても電磁場の値は変わらないように，$\boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}$ から四元ベクトル場は唯一には決まらない不定性を持つ．これは座標系の任意性から q が唯一には決まらないことに対応する．解析力学ではこのような物理的に同一の事象を表現する変数の取り方の自由度に関する議論が展開される，3.4 節でみる保存則もこれに関係している．

1.1.5　拡散方程式

場の運動方程式は時間に対して 2 階微分であるが，シュレディンガーの波動方程式での時間微分は 1 階微分であるという大きな違いがある．2 階微分は「作用の大きさで加速度が決まる」という力による因果関係というニュートン運動方程式の内容を引きずったものである．シュレディンガーの波動方程式はこういう物理作用の方程式ではない．

シュレディンガーの波動方程式と同じ様に時間の 1 階微分と空間の 2 階微分を含む方程式としては拡散方程式がある．空間的に一様でない気体のある位置での密度，流れの速度，温度といった $n(x), V(x), T(x)$ のようなマクロな量は多数の分子を含む小体積での平均された量であるが，分子はランダムな熱運動で飛び回っているのでこの小体積に留まらず絶えず出入りしている．自由な出入りを阻害しているのは原子同士の衝突である．自由に走行できる距離は有限であり，この長さが平均自由距離 ℓ である．いま，分子の数密度 n，平均熱速度 $\bar{v}$，衝突断面積 σ とすると．

$$\ell = (n\sigma)^{-1}, \tau = \ell/\bar{v}. \tag{1.18}$$

ここで τ は平均衝突時間である．

いま x 軸に垂直な平面（面積 A）を通過して単位時間にどれだけ熱運動で原子が移動するかを考えると，その流量は $nA\bar{v}/6$ と推定される．速度方向はランダムであるが，ある立方体の 6 面から出ていく様子を想定すると，ある指定した面を通過するのは全体の約 1/6 であると見なせる．次にこの A に垂直な方向に ℓ だけ離れた地点から飛び込んでくるのは面のある位置の密度 $n(x)$ ではなく $n(x \pm \ell)$ である．これらのことを考慮すると，面 A を通過する正味の流量は次のように推定できる．

$$J_x(x)A = \frac{(-\bar{v})}{6} n(x+\ell)A + \frac{\bar{v}}{6} n(x-\ell)A \approx -\frac{\bar{v}\ell}{3}\frac{dn}{dx}A = -D\frac{dn}{dx}A. \tag{1.19}$$

ここで $D = \bar{v}\ell/3$ は拡散係数と呼ばれる．流れ $J_x(x)$ の方向は密度勾配 dn/dx と反対の方向，すなわち．密度の不均一を打ち消す方向に拡散は起こるのである．いま x 方向に d 離れた二つの面に囲まれた小体積内の個数の時間 Δt での変化 $[\Delta n(x, t)]Ad$ の x 方向の密度勾配で出入は $[J_x(x+d) - J_x(x)]A\Delta t$ だから，

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = -D\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} \tag{1.20}$$

という拡散方程式が得られる．これは次元解析的には Δt の間に起こる拡散距離 Δx は $\Delta t \sim \Delta x^2/D$ であり，これは $\Delta x^2 \sim \ell^2(\Delta t/\tau)$ というランダム・ウォークの関係である．

拡散方程式とシュレディンガー方程式は後者で時間微分の前に複素記号 i がつくという差はあるが，自由粒子のシュレディンガー方程式 ($V(q)=0$) と類似している．(1.20) 式は $n(x,0)=n_0(x)$ として

$$n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\int_{-\infty}^{\infty} n_0(x')e^{-(x-x')^2/4Dt}dx'$$

という解を持つ．この解の特徴は空間的に局在した分布が時間の経過とともに広がった分布になっていくことである．この性質は Ψ の振る舞いにおいても共有されている．

1.2 シュレディンガーの方程式

1.2.1 シュレディンガーの方程式と場の方程式の違い

一個の粒子の位置を表す変数は運動空間が三次元であれば三個必要であり，変数をデカルト座標で表せば，シュレディンガー方程式は次のようになる．

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(q)\Psi,\ \text{ここで}\ \nabla^2 \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right). \tag{1.21}$$

一方，波動の源 F が存在する場合を含めた場の方程式の一般形は

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} - C^2\nabla^2\phi = F \tag{1.22}$$

である．二つの方程式は，t に関しては違っているが，空間微分の部分が同形である．このため，この偏微分方程式の解法は同じになり，これらの方程式を満たす解は干渉，回折，重ね合わせ，線形性などの数学的性質を共有している．このために，ϕ と Ψ が同じモノと錯覚しやすいのである．

シュレディンガー方程式を多粒子の場合に適用することを考えてみると ϕ と Ψ の従う方程式自体がまったく違うものであることが分かる．両者の差を列記すると次のようになる．

- Ψ の方程式には源 F がいかなる場合でも存在しない．したがって，ϕ は F により決まる次元を持つ量だが，Ψ の次元は不定である．
- ϕ は 1.1.3 節で述べたようにエネルギーに結びつくモノの変数である．それに対して Ψ はある状態にある確率を与えるものである．変数 q が a である状態の確率 $\Pr(a)$ が Ψ によって次のように与えられる．

$$\Pr(a) = |\Psi(q=a)|^2\Delta a\ \text{として,}\ \sum_a \Pr(a) = 1. \tag{1.23}$$

(もちろん $\Pr(a)$ は「$q = a$ を中点とする幅 Δa の範囲にある状態の確率」の意味であり，q は連続変数なので確率の規格化は $\sum_a \Pr(a) \to \int |\Psi(a)|^2 da = 1$ の意味であるが，確率が無次元量であることを際立たすためにこう書いておく.)

確率は無次元量となるように Ψ の次元は変数 q の次元で決まるが，確率の規格化条件には物理的次元は介在しない．その意味では Ψ は時空的なモノとしての存在ではないと言える.

- ϕ は三次元物理空間上の関数であるが，Ψ は変数空間上の関数である．1粒子の場合で場の方程式とシュレディンガー方程式がたまたま類似していたに過ぎない．N 個粒子系では位置が各々異なるから各々に別の変数が必要である．したがって，(1.21) 式には

$$\nabla^2 \to \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} \right) \tag{1.24}$$

の変更が必要であり，一般には $3N$ 次元空間上の偏微分方程式であり，Ψ も $3N$ 次元空間上の関数である．場 $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ が三次元空間上の時間変動する関数であるのとは大違いである.

- 粒子運動ではなく場の量子力学を考えると，q に代わる変数は $\phi_{x,y,z}$ であるから，シュレディンガー方程式は微分の部分は

$$\frac{\partial^2}{\partial q^2} \to \sum_{x,y,z} \frac{\partial^2}{\partial \phi_{x,y,z}^2} \tag{1.25}$$

のように置き換えることになる．添字 x, y, z は無限個もあり，それについての和になるのである．こんな演算の意味はつけにくい．また $\Psi(\phi_{x,y,z} \cdots)$ は $\phi_{x,y,z}$ を座標とする空間上の関数であるとなる．場の量子力学を実際にどうするかは次章で述べるが，シュレディンガー方程式はまったく違った姿になる.

- 場の方程式に着目すると，一般には $\phi_A (A = 1, 2, \cdots, M)$ のように場の種類が増えて互いに作用している形になる．例えば，電荷や電流が源としてある場合というのは電磁場の他に電子の場が存在していることである．こうした場合の場の方程式は，いくつもの ϕ_A についての連立方程式になる．また一般には線形微分方程式にはならない．それに対し，シュレディンガー方程式は変数が増えても一本の線形方程式であり，複数の場の相互作用は $\hat{H}$ の中に組み込まれることになる.

1.2.2 重なった状態と積状態

シュレディンガー方程式は完全に線形な微分方程式である．このために，ある解を知ると，それらから次々と新たな解を構成することができる．例えば $(i\hbar\partial/\partial t - \hat{H})\psi_1 = 0$，$(i\hbar\partial/\partial t - \hat{H})\psi_2 = 0$ であれば，ψ_1 と ψ_2 の重なった

$\Psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ も $(i\hbar\partial/\partial t - \hat{H})\Psi = 0$ を満たすから解である．

今度は A 粒子，B 粒子の 2 粒子系を考えて $(i\hbar\partial/\partial t - \hat{H}_A(\boldsymbol{x}_A))\psi_A(\boldsymbol{x}) = 0$ と $(i\hbar\partial/\partial t - \hat{H}_B(\boldsymbol{x}_B))\psi_B(\boldsymbol{x}) = 0$ を満たす $\psi_A(\boldsymbol{x}_A)$ と $\psi_B(\boldsymbol{x}_B)$ があれば，その積 $\Psi(\boldsymbol{x}_A, \boldsymbol{x}_B) = \psi_A(\boldsymbol{x})\psi_B(\boldsymbol{x})$ は

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_A(\boldsymbol{x}_A) - \hat{H}_B(\boldsymbol{x}_B)\right)\Psi(\boldsymbol{x}_A, \boldsymbol{x}_B) = 0$$

を満たす．ただしこれはハミルトニアンが $\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$ のよう A と B の変数が分離できる場合であり，$\hat{H} = \hat{H}_A(\boldsymbol{x}_A) + \hat{H}_B(\boldsymbol{x}_B) + \hat{H}_{int}(\boldsymbol{x}_A, \boldsymbol{x}_B)$ のように相互作用があれば分離できない．

次に，分離できる場合，各粒子が $\Psi_A = \alpha_{A1}\psi_{A1} + \alpha_{A2}\psi_{A2}$，$\Psi_B = \alpha_{B1}\psi_{B1} + \alpha_{B2}\psi_{B2}$ のように重なった状態にあれば，これらの積状態も解であることが分かる．したがって，一般に N 個の粒子の系を考えて，各粒子の状態が $\Psi_A = \sum_i^n \alpha_{Ai}\psi_{Ai}$ のように n 個の状態の重ね合わせであれば，それらの積状態 $\Psi = \Psi_A\Psi_B\Psi_C\cdots$ は n^N 個の状態の重なった状態となる．

シュレディンガーの方程式を数学的に眺めていくとこういうことを教えてくれる．したがってこの方程式の解に対する物理的な解釈もこうした数学的特徴に整合したものでなければならない．

1.3 ヤングの干渉

1.3.1 「粒子と場」と素粒子

量子力学の不思議さとして，ヤングの干渉実験がよく例に出される．身近な光という物理的対象で「古典」と「量子」の関係を見る好例である．しかし，波動運動の古典的な干渉効果，シュレディンガー波動関数の干渉効果，光という同一のモノを光子という粒子と見なした時の干渉効果，これらは同じ干渉という言葉を使っているが質的な差にも注意する必要がある．第 5 章からの状態ベクトルによって量子力学を書き表す形式に本格的に入る前に，物理的な内容に重点を置いて題材を整理しておく．

光の遮蔽板に穿たれた二つのスリットを通った光がその先のスクリーン上に干渉縞を作る現象はイギリスのトーマス・ヤングにより発見された（1800 年）．光についての二つの説（粒子か？波動か？）のうち，これは波動説を支持するもので，マックスウェルの光の電磁波説（1861 年）に途を開いた．ところが，プランクの黒体放射の理論（1900 年）で導入されたプランクの作用定数 $\hbar$ を用いて，アインシュタインは光電効果という現象は光の粒子説で説明できることを示した（1905 年，光子説）．こうして光は波動と粒子という互いに矛盾する性質を併せ持つ二重性の謎が登場した．この光子を含む素粒子というモノに関する研究は 1980 年頃までに相互作用の標準理論として完成した．そこでは

クォーク，レプトン，ゲージ・ボゾンは全て場というモノである．光子はゲージ・ボゾンの一つであるが，その量子力学での姿が二重性を持つことを次章でみる．

ヤング干渉実験が“量子力学の不思議さ”として語られるのは，光を粒子と見なすことで生ずる“不思議さ”である．一個の光子が二つのスリットを通ったという状態が重なっているという量子力学の神髄が200年以上前のヤングの実験の中に既に姿を見せていたのである．しかしこの実験と量子力学の不思議さを結びつけるのは意外に難しい．理由は二つある．一つは，光子の理論は場の量子力学であり，粒子の量子力学よりは高度であること，もう一つはシュレディンガーの波動関数の波動に引っ掛けて古典波動の干渉効果で分かったと誤解してしまうことである．光子のヤング干渉は量子力学のエンタングルメントによって生ずることを 2.2.1 節で述べる．

物質は素粒子からできており，素粒子は量子化された場であるからと言って，物質が織りなす多彩な物理現象をすべてを量子化された素粒子場で扱うわけではない．量子力学は運動の一般理論であって，それが素粒子という特殊なモノにも適用可能なのである．標準理論の完成は素粒子現象も量子力学という理論の一応用分野に過ぎなかったという教訓である．音波や渦といったマクロな連続体の運動モードにも量子力学が直接適用される．フォノンや超流動といった量子現象はそうした例である．近年のナノテクロジーはマクロとミクロの中間の領域に多彩な量子現象を切り拓きつつある．

1.3.2　波動の位相差によるヤング干渉

古典的な波動の立場からするヤングの干渉実験装置の数理を復習しておく．z 方向に進む波動がその進行方向に垂直に置かれた遮蔽板にまず当たる．遮蔽版には細いスリット状の二つの横長の穴（水平方向には十分長い）が開いていて，そこから漏れた光がその背後のスクリーン上に像を結ぶ．遮蔽板とスクリーンの間の距離を z_0 とする．遮蔽版の二つのスリットの穴の幅を a，それらの間隔を $d(d > a)$ とする．鉛直方向を x 方向 にとり，遮蔽板上の位置座標（x 座標，z 座標）を $(\xi, 0)$，スクリーン上の位置座標を (x, z_0) と書く．スリットは十分横に長いとして，それに沿った方向（y 方向）の変動は無視する．スリット「上」の開口座標は $(d/2 - a/2, 0)$ から $(d/2 + a/2, 0)$，スリット「下」のは $(-d/2 - a/2, 0)$ から $(-d/2 + a/2, 0)$ である．

2 点，$(\xi, 0)$ と (x, z_0)，の間の距離を，$z_0 \gg a$ の近似の下で計算すれば，$R = \sqrt{z_0^2 + x^2}$ として，

$$r = \sqrt{z_0^2 + (x - \xi)^2} = R\sqrt{1 - \frac{2x}{R^2}\xi + \frac{\xi^2}{R^2}} \simeq R - \frac{x}{R}\xi. \tag{1.26}$$

スリット穴の各点を同一振幅，同一位相の波が通過したとしてもスクリーン上に達した時の波には距離の違いによって位相差が生ずる．ホイヘンスの原理に

よって位相差はスリットの各点から Ae^{-ikr}/R の球面波が生じたとして計算される（$k = 2\pi/\lambda$ は波数，λ は波長）．スクリーン上の点 (x, z_0) の波動は二つのスリットを通過してくる波動の重ね合わせで与えられる．“重ね合わせ” とはスリット内の位置座標についての積分をすることである．したがって,「下」のスリットからの波動 $\phi_{下}$ と「上」スリットからの波動 $\phi_{上}$ の重ね合わせは

$$\begin{aligned}
\phi_{下} + \phi_{上} &= \frac{A}{R}\int_{-d/2-a/2}^{-d/2+a/2} e^{-i\alpha\xi}d\xi + \frac{A}{R}\int_{d/2-a/2}^{d/2+a/2} e^{-i\alpha\xi}d\xi \\
&= \frac{Ae^{i\alpha d/2}}{R}\frac{e^{i\alpha a/2} - e^{-i\alpha a/2}}{i\alpha} + \frac{Ae^{-i\alpha d/2}}{R}\frac{e^{i\alpha a/2} - e^{-i\alpha a/2}}{i\alpha} \\
&= \frac{4A}{\alpha R}\cos\frac{\alpha d}{2}\sin\frac{\alpha a}{2},\quad \text{ここで } \alpha = \frac{kx}{R}
\end{aligned} \tag{1.27}$$

と与えられるから，スクリーン上での強度分布 $|\phi_{下} + \phi_{上}|^2$ は次のようになる．

$$\begin{aligned}
I &= \left(\frac{4A}{kx}\right)^2 \cos^2\frac{kd}{2R}x\sin^2\frac{ka}{2R}x \\
&= \left(\frac{4A}{kx}\right)^2 \frac{1+\cos\frac{kd}{R}x}{2}\sin^2\frac{ka}{2R}x.
\end{aligned} \tag{1.28}$$

これは $x = 0$ を中心とした幅 $2R\lambda/a$ の広い山の中に，より狭い幅 $R\lambda/d$ の縞模様を表している．$x = 0$ の強度は $(2Aa/R)^2$ である．

電磁波では ϕ 自体がエネルギーを担うモノであり，強度分布 $|\phi_{下} + \phi_{上}|^2$ は発光の強度分布を決める．一つのスリットの場合でも，スリットを通った光線は直進方向から逸れて，横に広がる．広がりの程度は $ka\Delta x/2R = \pi$ の条件から，$\Delta x = (\lambda/a)R$ となる．すなわち，$\Delta\theta = \Delta x/R = \lambda/a$ の角度の広がりができるのである．この効果は回折と呼ばれる．望遠鏡による天体の方角を定める角度分解能がこの $\Delta\theta$ で決まることが知られている．

「二重スリットの干渉実験」というときは，$d \gg a$ の場合である．そして，$|\phi_{下} + \phi_{上}|^2 = |\phi_{下}|^2 + |\phi_{上}|^2 + (\phi_{下}\phi^*_{上} + \phi^*_{下}\phi_{上})$ の最後の $(\ldots)$ の部分を干渉項と呼ぶ．

1.3.3 量子力学の干渉効果

$V = 0$ のシュレディンガー方程式は $\Psi = A\exp[i(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})]$ の解を持つ．ここで，$\hbar\omega = (\hbar k)^2/2m$ である．$E = \hbar\omega$ というアインシュタインの関係とド・ブロイの関係 $(\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k})$ を通して，これは $E = (1/2m)p^2$ という質量 m の粒子のエネルギーと運動量の関係を表している．

前述の光の場合と同様に z 方向に進むこの波動 Ψ が二つのスリットを通ってスクリーンに達するときのスクリーン上での強度分布は $|\Psi_{下} + \Psi_{上}|^2$ となる．しかし Ψ の場合は電磁波の場合の様にエネルギーを担うものではない．Ψ は一個の粒子の情報を担うものであり，$|\Psi(x)|^2$ はその粒子が x に到達する確率を与える．

同じ Ψ で表される状態の粒子を多数用意して，何回もスクリーンをヒットする実験を繰り返す．その各地点へのヒット回数を集積してヒストグラムに書くと，その分布が $|\Psi_{\text{下}} + \Psi_{\text{上}}|^2$ に比例するのである．毎回の実験ではどこをヒットするか分からないが，ヒットの回数を増やせば次第にこの分布の形になる．

前述のように，この分布には回折と干渉の効果が含まれている．干渉の効果は縞模様であるが，これは一個の粒子が「上」のスリットを通過した状態 $\Psi_{\text{上}}$ と「下」のスリットを通過した状態 $\Psi_{\text{下}}$ の重ね合わせで生じたのである．粒子は一個なのだが何れを通過するかは等確率であるから，同じウェイトで重ね合わせたのである．もちろん,「上」と「下」で差をつけて，$\Psi = \alpha\Psi_{\text{下}} + \beta\Psi_{\text{上}}$ のように重ね合わせることもできる．

次に回折効果を粒子運動的に解釈し直すこともできる．スリットを通過したかどうかを確かめることは x 方向の位置を $\Delta x = a$ の精度で確かめることである．ところがこれによって x 方向の運動量が生じてその大きさは $\Delta p_x = \Delta\theta p_z$ となる．したがって

$$\Delta x \Delta p_x = 2\pi\hbar \tag{1.29}$$

という関係が得られる．すなわち，測定精度 Δx と Δp_x の間には一方を良くすると他方が悪くなるというトレードオフの関係があることが分かる．

コラム1　量子力学の現在：モノとコト，対象と手法

量子力学の概略を記しておく．黒体放射の統計力学からプランクが作用量子 $\hbar$ を導入したのは1900年であるが，行列力学や波動力学が姿を現したのは1926年頃であり，この間，四半世紀もの時差がある．本書でいう量子力学はハイゼンベルグ，シュレディンガー，ディラック，フォン・ノイマン等によって切り拓かれた量子力学の数理的枠組みのことである，筆者はこれを「$\hbar$ のない量子力学」と言っている．

物理学は時空上に存在するモノを実験で探索し，それらが引き起こすコトを数理的な法則性で記述する学問である．実験においても現象を測定器で数値化する．これが物理学の二本柱である．「モノの探索」は「光子からクォークまで」,「水素原子から DNA まで」,「トランジスターから LED まで」,「超流動からグラフェンまで」など多様に進展し，これらのモノの登場をきっかけとしてコトの数理法則化も並走した．モノの探索は重さを持つマクロな物体から出発して，技術の進歩により，電磁場，原子，素粒子などを発見してきた．コトの数理記述では，天体から原子までの広範なモノの軌道というコトを [質量]×[加速度]=[力] というニュートンの運動方程式から演繹することに成功した．さらに，熱や音，気体や流体といったコトもこの方程式に還元して記述した．その際に力と運動という物理学独特の概念に追加して，統計という新しい数理ツールが導入された．

歴史的には，熱というコトを原子というモノを介して粒子の力学に還元するという統計力学の構築の中から統計学の手法が生まれた．しかし，出生地は確かに原子集団の物理学であったが，現在の学問体系から言えば，統計学は様々なモノやコトに拘束されない一般的な学問として独立したと言える．すなわち「原子のない統計力学」である．

歴史をみると，こうした一般性を持つ法則性の認識は，具体的なモノやコトの科学を経由している．しかし後知恵ではあっても，広がった一般性を持つ手法はバージョンアップした上で次の段階を目指すべきなのである．出自の対象に拘ることなく，常にモノを離れた一般化の手法への昇格を試みるべきなのである．理論物理独自の存在意義はそういうところにあるのだといえる．

物理学では「モノの探索」と「コトの数理法則化」は平行して進むが，学問的営みには常にモノや対象を飛び越えた一般法則性としての進展を反省・省察してみる必要があり,「コトの数理法則化」の一般性を省察してみるべきなのである．量子力学成立時，その解釈を巡って論争したボーアやアインシュタインといった巨人たちよりも遥かに大きな視野で我々はこの問題を考えることができるのである．

第 2 章
場の量子力学

量子力学の波動性と場の波動性の混同に陥らないためには，場の量子力学を掌握しておかねばならない．量子力学の学習は粒子の量子力学から始まって場の量子力学にまでは進まない場合が多い．相対論的形式保持や，自由度が無限大とか，急に難題が登場するからである．本章で概観する場の量子力学ではこうした厳密な議論には深入りせずに，前章に述べた「場は多粒子結合系の極限である」という見方に立って議論する．

2.1　場と粒子の読み替え

2.1.1　電磁場のハミルトニアン

場を量子力学で扱うには場の変数のハミルトニアン H が必要である．電磁場や音波といった古典場の力学では，いきなり運動方程式を扱い，H は普通は登場しない．しかし，場でも粒子でも，量子力学では H が必要であり，運動方程式は登場しない．

場の変数 $A(z,t)$ の力学を 3.1.4 節で述べる様なラグランジアン密度 $\ell(A,\dot{A},A')$ からスタートする．

$$\ell = \frac{1}{2}\left[\dot{A}^2 - c^2\left(\frac{\partial A}{\partial z}\right)^2\right]. \tag{2.1}$$

電磁場の場合は $E = \dot{A} = \frac{\partial A}{\partial t}$，$B = A' = \frac{\partial A}{\partial z}$ である．ラグランジアンは $L = \int \ell dz$ である．簡単のため空間一次元で話を進めるので，物理量の次元はしばらく無視する．

ここで，粒子の変数 (p,q) に対応する正準共役変数 (π, A) を導入する．ℓ から運動量 π が定義され，ハミルトニアン密度 h が次のように導かれる．

$$\pi = \frac{\partial \ell}{\partial \dot{A}} = \dot{A}, \quad h = \pi\dot{A} - \ell = \frac{1}{2}\left[\pi^2 + c^2\left(\frac{\partial A}{\partial z}\right)^2\right]. \tag{2.2}$$

次に力学変数のセット $A(z,t)$ を他のセットに変換する．前にも述べたように z の各点に別々の変数があるのだから $A_z(t)$ という変数のセットなのである．ここでは $A(z,t)$ の代わりに，次のようなそのフーリエ成分 α_k を新しい力学変数のセットに採用する．

$$A(z,t) = \int [\alpha_k(t) \exp ikz + \mathrm{C.C.}] dk. \tag{2.3}$$

ここで最大波長 L がある場合を考えれば（box 規格化），波数は $k_j = 2\pi j/L$ のように整数 j で分類できるものになり，積分は和に変わって

$$A(z,t) \to \sum_{j=1}^{\infty} \left[\alpha_j(t) \exp i \frac{2\pi j}{L} z + \mathrm{C.C.} \right]. \tag{2.4}$$

A_z から α_j への線形変換の変換行列が $e^{i\frac{2\pi}{L}jz}$ である．ラグランジアン L は

$$\int \ell dz \to \frac{1}{2} \sum [\dot{\alpha}_j \dot{\alpha}_j^* - \omega_j^2 \alpha_j \alpha_j^*], \text{ ここで } \omega_j = ck_j \tag{2.5}$$

となる．複素変数が二つに実変数の自由度になることを考慮すれば，実変数を q_j としてラグランジアンは次の形になる．

$$L(q_j, \dot{q}_j) = \frac{1}{2} \sum [\dot{q}^2 - \omega_j^2 q_j^2]. \tag{2.6}$$

共役運動量 $p_j = \dot{q}_j$ を用いて，ハミルトニアンは

$$H = \sum_j \bar{H}_j, \text{ ただし } \bar{H}_j = \frac{1}{2}[p_j^2 + \omega_j^2 q_j^2] \tag{2.7}$$

となり，場の力学は調和振動子の集団と見なせることが分かる．

2.1.2 調和振動子の量子化

質量 m，バネ係数 κ の調和振動子を考える．エネルギーの感覚が分かるように，次元を含めて書く．ハミルトニアン H は，$\omega^2 = \kappa/m$ と書いて，

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{p^2}{m} + \kappa q^2\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{p^2}{m} + m\omega^2 q^2\right). \tag{2.8}$$

H は次のように因数分解できる．

$$\begin{aligned} H &= \frac{\omega\hbar}{2}\left(\frac{p^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{\hbar} q^2\right) \\ &= \omega\hbar \left(i \frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q\right)\left(-i \frac{p}{\sqrt{2m\hbar\omega}} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q\right). \end{aligned} \tag{2.9}$$

量子力学では正準変数 (p,q) はオペレータとして扱い，次の交換関係 $[q,p] = qp - pq = i\hbar$ が課せられる．いま $p/\sqrt{m\hbar\omega} = P, \sqrt{m\omega/\hbar} q = Q$ と置くと $[Q,P] = i$．これで次のような新変数 $(a, a^\dagger)$ を導入する．

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP),\ a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP). \tag{2.10}$$

Q, P の交換関係を $a, a^\dagger$ について書き直すと

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{2.11}$$

という交換関係になる．変換の係数に ω が含まれているから a_ω と書くべきであるが，一つの ω だけを扱うので添字は省略する．複数の ω の場合は $[a_\omega, a^\dagger_{\omega'}] = \delta_{\omega\omega'}$ となる．

$\hat{H}$ を作用素 $a, a^\dagger$ で書く際に，数値の場合と違って，a と $a^\dagger$ の積の順番が問題になる．これは追加の条件で定めるが，例えば次のように対称化すると，

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\omega\hbar(aa^\dagger + a^\dagger a) = \omega\hbar\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right). \tag{2.12}$$

電磁場の A と無次元の a との変換の係数は次のように空間積分したエネルギーと比較して求められる．すなわち

$$\frac{1}{2}\int_V (\epsilon_0 \dot{A}^2 + \mu_0^{-1} A'^2) dV = \frac{1}{2}\sum_j [p_j^2 + \omega_j q_j^2] \tag{2.13}$$

として，$a = (p - iq)/\sqrt{2\hbar\omega}$ と変換する．したがって次元変換に注目して書けば $A \to \sqrt{\hbar/(2\epsilon_0 \omega V)}a$ である．

2.1.3 個数状態

$a|0\rangle = 0$ を満たす状態 $|0\rangle$ を定めると，この状態はエネルギーが最低の状態であり，真空状態と呼ばれる．交換関係に左から $a^\dagger$ をかけると $a^\dagger aa^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger$．次に右から $|0\rangle$ をかけると $a^\dagger aa^\dagger|0\rangle - a^\dagger a^\dagger a|0\rangle = a^\dagger|0\rangle$ ．いま $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$ と書けば，$a^\dagger a|1\rangle = 1 \times |1\rangle$ という形になる．これは状態 $|1\rangle$ が作用素 $\hat{N} = a^\dagger a$ の固有状態で，その固有値が 1 であることを示している．これをヒントに真空状態に $a^\dagger$ を次々とかけて $\hat{N}$ の固有状態 $|n\rangle$ が作れる．すなわち

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \tag{2.14}$$

これらの固有状態 $|n\rangle$ は次のように H の固有状態でもある．すなわち

$$\hat{H}|n\rangle = \omega\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle. \tag{2.15}$$

こうして調和振動子のエネルギー固有状態は $n = 0, 1, 2, 3, \cdots$ で分類され，エネルギーは $\omega\hbar(n + \frac{1}{2})$ のように離散的な値を持つ．古典論では調和振動子のエネルギーは振幅の大きさで決まり，連続的な値が取れる．それが離散的になったということは振幅が離散的な値しか取れなくなったことを意味する．古典論の近似がいいのは $n \gg 1$ の場合であり，そこでは絶対値 E に比べて離散の跳び ΔE は $\Delta E/E \sim 1/n$ と小さいので殆ど連続と見なせるのである．

$n = 0$ でもエネルギーがゼロでなく真空エネルギー $\omega\hbar\frac{1}{2}$ を持つが，各エネルギー固有値の差はすべて $\omega\hbar$ である．したがってこのエネルギーを「$\omega\hbar$ のエ

ネルギーを持つ粒子が n 個あるから $\omega\hbar n$ である」とも見なせる．こういう観点から $\hat{N}=a^\dagger a$ は光子の個数演算子と呼ばれる．

ここでの議論のフーリエ変換では最大波長を導入したが，最小波長を仮定しなければモードの数 j は無限個ある．このため各自由度につきまとう真空エネルギーの和が無限大になる．この「発散の困難」の解決の処方が朝永，ファインマン，シュビンガーによる繰り込み理論である．“繰り込み” という考え方は簡単に言うと差額主義である．エネルギーを測るとは真空からの差額が測定されるだけである．そういう立場からいうと無数の効果が繰り込まれたものが測定される物理量である．繰り込み理論では測定される量は「裸の量ではなく衣を着た量である」と表現される．

2.1.4　調和振動子の波動関数

ここで振り返っておくと場 A は作用素であり，フーリエ変換によって新たな作用素 $a_j, a_j^\dagger$ に引き継がれ，これは調和振動子を記述する変数と見なすことができる．A と a_j の間の線形変換の係数としてフーリエ変換の $\exp[ikz]$ 関数がある．

調和振動子なら粒子の力学だからシュレディンガーの波動関数で記述できる．いまはエネルギーの固有状態を問題にするから $\Psi=e^{-iEt/\hbar}u_E(Q)$ と置いて，シュレディンガー方程式は

$$Eu_E=\omega\hbar\frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dQ^2}+Q^2\right)u_E. \tag{2.16}$$

一方，$E=\omega\hbar(n+1/2)$ であるから，$u_n(Q)$ は

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dQ^2}+Q^2-1\right)u_n=nu_n \tag{2.17}$$

を満たす．$n=0$ では $u_0\propto e^{-Q^2/2}$．$u_n\propto(a^\dagger)^n u_0$ だから，規格化されたこの固有関数は，$A_n=(\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2}$ として，

$$u_n=A_n\left(Q-\frac{d}{dQ}\right)^n e^{-Q^2/2}=A_nH_ne^{-Q^2/2} \tag{2.18}$$

で与えられ，H_n はエルミット多項式と呼ばれる．例えば $H_0(x)=1$，$H_1(x)=2x$，$H_2(x)=4x^2-2$，$H_3(x)=8x^3-12x$，$H_4(x)=16x^4-48x^2+12,\cdots$ などとなる．n は $u_n=0$ となるゼロ点の数と一致している．

2.1.5　場の量子状態：光子・コヒーレント・スクイズド

光子の見方と古典電磁波の関係を見てみる．量子化された場は作用素だからそれ自体で値を持たず，量子状態を指定して初めて測定結果と関係する．逆に量子状態を決めても測定する作用素を決めないと測定との関係がつかない．

いま作用素 $(a_j, a_j^\dagger)$ で議論を進めると，量子状態は各モード j がどれだけ励

起されているかを n_j で与えている．そのエネルギーは $\omega_j\hbar n_j$ である．一般の振動は多くのモードの励起で指定されるから，すべての j に対して n_j の組 $(n_1, n_2, \cdots)$ で表される．そのような量子状態を

$$|n_1, n_2, \cdots\rangle \tag{2.19}$$

と書くと，エネルギーは

$$\hat{H}|n_1, n_2, \cdots\rangle = \sum_j \omega_j\hbar\left(n_j + \frac{1}{2}\right)|n_1, n_2, \cdots\rangle. \tag{2.20}$$

ここで場から粒子への読み替えをする．すなわち量子状態 $|n_1, n_2, \cdots\rangle$ とはエネルギー $\omega_1\hbar$ を持つ粒子が n_1 個，エネルギー $\omega_2\hbar$ を持つ粒子が n_2 個，エネルギー $\omega_3\hbar$ を持つ粒子が n_3 個，$\cdots$ という読み替えである．アインシュタインは振動数 ν_j の一個の光子のエネルギーは $\epsilon_j = \omega_j\hbar = h\nu_j$ とした．ここで状態のラベル s を状態ベクトルの添え字につけて $|n\rangle_s$ と書けば，一般の状態は

$$|n_1, n_2, \cdots\rangle = |n\rangle_1|n\rangle_2|n\rangle_3\cdots \tag{2.21}$$

と表せる．s の決まった光子を扱うなら，$|n\rangle_s$ は，エネルギーというよりは，個数作用素 $\hat{N}_s$ の固有状態である．また $a^\dagger$ の作用は一個粒子を創るので生成演算子，a は一個減らすので消滅演算子と呼ばれる．

ここで量子状態の分類の仕方は決してユニークでないことに注意しておく．個数演算子による分類はあくまでも一つの分類の仕方でありフォック状態とも呼ばれる．その他の分類法としては，例えば a そのものの固有状態を導入することもできる．すなわち

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{2.22}$$

のような，固有値が α となる固有状態 $|\alpha\rangle$ である．このような量子状態はコヒーレント (coherent) 状態と呼ばれる．また，$a, a^\dagger$ そのものではなく，それらの一次結合

$$b = \mu a + \nu a^\dagger,\, b^\dagger = \mu^* a^\dagger + \nu^* a \tag{2.23}$$

も，$|\mu^2 - |\nu|^2 = 1$ なら，$[b, b^\dagger] = 1$ である．$b, b^\dagger$ の固有状態はスクイズド (squeezed) 状態と呼ばれ，量子光学の技術の進展で μ, ν が制御できるようになっている．

コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ とフォック状態（個数状態）$|n\rangle$ の間には次の関係にあることが示せる．

$$|\alpha\rangle = \exp[-|\alpha|^2/2]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \tag{2.24}$$

上式の両辺に a をかけて，$a|n\rangle = \sqrt{n+1}|n-1\rangle$ を使うと (2.22) 式が導かれ

ることからこの関係を確かめることができる．

古典電磁波の振幅は電場・磁場の強さのことであり，これらは個数の平方根に比例する．大きさと位相を分けて $a = \sqrt{N+1}\exp i\phi$ と書き，各々の平均値からのばらつきを求めると次のようになる．

$$(\Delta N)^2 = \langle\alpha|(\hat{N} - \langle N\rangle)^2|\alpha\rangle = |\alpha|^2, \quad \Delta\phi \sim \frac{1}{|\alpha|}. \tag{2.25}$$

ここで $\langle N\rangle = \langle\alpha|\hat{N}|\alpha\rangle = |\alpha|^2$. $\Delta N/\langle N\rangle = 1/\sqrt{\langle N\rangle}$ だから，

$$\Delta N \Delta\phi \sim 1 \tag{2.26}$$

という関係が導かれる．

これらの関係から分かることは，平均個数が多い，すなわち振幅が大きいと，振幅と位相が確定した古典場の性質に近づくことである．しかし，強力な古典電磁波が $\langle N\rangle$ の大きなコヒーレント状態なのではない．熱励起の可視光の光源では原子から光子が一個ずつ放出された，位相がバラバラの，多数の光子の混合集団である．一方，レーザー光源では幾つかの原子群が連動して（コヒーレントに）複数の光子群が放出されたものであり，理想的なコヒーレント状態ではないがそれに近づいたものである．

2.2 量子状態のエンタングルメント

2.2.1 光子としてのヤング干渉縞：量子場と量子状態

ヤングの干渉実験に戻る．この場合の光源は原子の熱励起で放出された多数の光子の混合集団である．だから各光子の位相はまちまちであって，違った光子間の干渉は起きない．干渉縞の干渉はあくまで一個の光子が二つのスリットを通過するということによるものである．多数回のこの干渉イヴェントの集積結果として肉眼で見えるほどの縞模様が見えるのである．各イヴェント毎には一個の光子がスクリーン上の一カ所をヒットするだけである．集積する時間は人間の視覚では約 0.03sec，写真撮影では露出時間に関係して決まる．現在の技術で，弱い光源による干渉を超高速カメラで撮影して集積時間を短くすると縞模様は見えず，集積時間を長くすると縞模様が浮き出てくる．

この一個の光子による干渉を量子力学の枠で議論するには，関与する物理量の作用素と量子状態を指定しなければならない．測定されるのはスクリーン上での光子の電磁場である．電磁ポテンシャル $\hat{A}$ から決まるから今は $\hat{A}$ に着目する．スクリーン上の位置 (x, z_0) の $\hat{A}$ は上下二つのスリットを通過した $\hat{A}$ の重なり合いで決まるから，

$$\begin{aligned}\hat{A}(x, z_0) &= \hat{A}_{上} + \hat{A}_{下} \\ &= [\alpha(x)_{上}\exp(ikz_0 - i\omega t)]a_{上} + [\alpha(x)_{下}\exp(ikz_0 - i\omega t)]a_{下}.\end{aligned} \tag{2.27}$$

ここで振幅 $\alpha(x)_a$ ($a=$ 上，下) は $\alpha(x)_a = |\alpha| \exp i\phi_a$ のように位相だけが違っているから，共通部分を省略すると

$$\hat{A}(x, z_0) = (\exp i\phi_{\text{上}})a_{\text{上}} + (\exp i\phi_{\text{下}})a_{\text{下}} \tag{2.28}$$

と書ける．一方，光子のエネルギー（光子場のエネルギー）の作用素は $\hat{A}^\dagger \hat{A}$ に比例する．したがって，

$$\hat{W}(x, z_0) = \hat{A}^\dagger \hat{A} = a^\dagger_{\text{上}} a_{\text{上}} + a^\dagger_{\text{下}} a_{\text{下}} + \beta^* a^\dagger_{\text{上}} a_{\text{下}} + \beta a^\dagger_{\text{下}} a_{\text{上}}. \tag{2.29}$$

ここで

$$\beta = \exp[i(\phi_{\text{上}} - \phi_{\text{下}})] = \left[\exp -i\frac{kd}{R}x\right] \frac{\sin(ka/2R)x}{x} \tag{2.30}$$

であるが，以下の議論では $a \to 0$ の近似の式を書く．

今度は光子の量子状態に着目する．上下の各スリットに光子「有」状態を $|1\rangle$，光子「無」状態を $|0\rangle$ で表す．まず，何れにも光子が無い状態は $|\psi\rangle = |0\rangle_{\text{上}}|0\rangle_{\text{下}}$ であり，$\langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle = 0$ である．次に光子がある四つの場合を考えるが，量子状態が違えば $\hat{W}$ の期待値は大きく異なる．

（イ）光子一個のエンタングルした（もつれた，絡み合った）状態．

ここでの状態の絡み合いは，上下各位置での光子「有」状態 $|1\rangle$,「無」状態 $|0\rangle$ の二つの状態の絡み合ったものである．状態

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_{\text{上}}|0\rangle_{\text{下}} + |0\rangle_{\text{上}}|1\rangle_{\text{下}}) \tag{2.31}$$

に対する $\hat{W}(x, z_0)$ の期待値 $W = \langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle$ は

$$W \sim \langle\psi|a^\dagger_{\text{上}} a_{\text{上}} + a^\dagger_{\text{下}} a_{\text{下}}|\psi\rangle + \langle\psi|\beta^* a^\dagger_{\text{上}} a_{\text{下}} + \beta a^\dagger_{\text{下}} a_{\text{上}}|\psi\rangle. \tag{2.32}$$

右辺第二項は個数状態の変化を伴い，各々

$$a^\dagger_{\text{下}} a_{\text{上}}|1\rangle_{\text{上}}|0\rangle_{\text{下}} + a^\dagger_{\text{下}} a_{\text{上}}|0\rangle_{\text{上}}|1\rangle_{\text{下}} = |0\rangle_{\text{上}}|1\rangle_{\text{下}},$$

$$a^\dagger_{\text{上}} a_{\text{下}}|1\rangle_{\text{上}}|0\rangle_{\text{下}} + a^\dagger_{\text{上}} a_{\text{下}}|0\rangle_{\text{上}}|1\rangle_{\text{下}} = |1\rangle_{\text{上}}|0\rangle_{\text{下}}$$

のようになる．最終的には

$$\langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle \sim 2 + 2\cos\left[\frac{kd}{R}x\right] = 4\cos^2\left[\frac{kd}{2R}x\right]. \tag{2.33}$$

1 光子による一回のイヴェントでは，光子はスクリーン上のどこかの位置 x に検出される．$\langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle$ はその確率を与えており，多数回繰り返された時の度数分布を表す．干渉縞とはこの度数分布に見られるパターンなのである．

（ロ）個数状態の積状態．

これは $|\psi\rangle = |n_1\rangle_{\text{上}}|n_2\rangle_{\text{下}}$ のように，上を n_1 個，下を n_2 個の光子が通過する状態である．この場合は $\langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle = n_1 + n_2$ であり，干渉項はゼロである．

干渉には“絡み合い”が必須であることが分かる．

（ハ）コヒーレント状態の積状態．

この状態は

$$|\psi\rangle = |\alpha_1\rangle_{上}|\alpha_2\rangle_{下} \tag{2.34}$$

と表せる．この場合は

$$\langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle \sim \alpha_1^*\alpha_1 + \alpha_2^*\alpha_2 + \beta^*\alpha_1^*\alpha_2 + \beta\alpha_1\alpha_2^* \tag{2.35}$$

$$= [\alpha_1(\exp i\phi_{上}) + \alpha_2(\exp i\phi_{下})]^*[\alpha_1(\exp i\phi_{上}) + \alpha_2(\exp i\phi_{下})] \tag{2.36}$$

のように，古典的波の干渉と同じになり，干渉縞が現われる．

（ニ）光子無しとコヒーレント状態の絡み合った状態．

コヒーレント光が上下いずれかを通過した状態の重ね合わせとして

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\alpha\rangle_{上}|0\rangle_{下} + |0\rangle_{上}|\alpha\rangle_{下}] \tag{2.37}$$

なる状態が考えられる．この場合には干渉項がゼロになる．

2.2.2 光子とシュレディンガー方程式の関係

量子力学の干渉効果としてヤングの干渉が引き合いに出されるのは“量子状態の干渉”の意味においてである．しかし上述の光子の干渉の説明における位相差の起源は作用素である場が波動方程式に従うことにあり，シュレディンガー方程式に起因するものではない．ところが，普通，粒子の量子力学での干渉効果はシュレディンガー方程式の波動性に起因するかのように説明される．そこでは，光子に対するシュレディンガーの波動関数が粒子の場合と同様に

$$\Psi = (\psi_{上} + \psi_{下})/\sqrt{2}$$

のように状態の重ね合わせで与えられ，スクリーン上の存在確率 $\mathrm{Pr}(x, z_o)$ が

$$\mathrm{Pr}(x, z_o) = \Psi^*\Psi = \frac{1}{2}(|\psi_{上}|^2 + |\psi_{下}|^2 + \psi_{上}^*\psi_{下} + \psi_{上}\psi_{下}^*) \tag{2.38}$$

となり右辺の後の二項が干渉効果を与える，と説明される．この説明での位相差の起源は $\psi_{上}$ と $\psi_{下}$ がシュレディンガー方程式に従うことにある．

光子と（非相対論的）粒子での位相差の起源を振り返ってみると，光子の $A(x, z_0) \sim ae^{i(\omega t-kr)}$，粒子の $\psi(x, z_0) \sim e^{i(\omega t-kr)}$ で，スリット上下からスクリーン上の位置 (x, z_0) までの距離 r が上下で異なることに原因があった．位相差が現れる数式部分は同じだが，A は作用素，ψ は状態関数と異なるものである．同じ $e^{i(\omega t-kr)}$ でも，ω と k の関係は，A では場の方程式に従うから $\omega^2 = c^2k^2$，ψ では $V = 0$ のシュレディンガー方程式に従うから $\hbar\omega = (\hbar^2/2m)k^2$ となる．光子を粒子だとしてシュレディンガー方程式で論じようとして，ハミルトニアンを $H = cp$ に変えて $p \to -i\hbar(\partial/\partial r)$ の置き換えをしたとする．するとこの

ハミルトン演算子では，運動量の向きを逆にするとエネルギーの符号も変わるようになり，これはエネルギーの概念に合わない．じつは，古典論でのエネルギーと運動量の関係は $E = cp$ ではなく，$E^2 = c^2p^2$，あるいは $E = c|p|$ なのである．しかし $|p| \to -i\hbar(\partial/\partial r)$ の置き換えが頓挫してエルミット共役なエネルギー作用素が作れない．光子という粒子のシュレディンガー方程式はどう書けばいいのか分からず宙に浮くのである．

もともと光子とは生成消滅する存在だから個数が保存する粒子という存在ではない．だから光子現象一般を粒子の力学に押し込めることは不可能である．しかし，生成消滅がない光子の伝搬についてだけは粒子のイメージで議論しても許されると思うかもしれないが，そのためのシュレディンガー方程式が無いのである．これは相対論的粒子についても同じである．些細に見える例だが，ヤング干渉の一件はシュレディンガー方程式は量子力学の基礎でないことを教えているのである．シュレディンガー方程式はより一般的な量子力学の原理のある特殊な場合での表現法なのである．連続的な変数 (p, q) などが登場しない場合も包括するより一般的な量子力学の原理が必要なのである．

コラム2 プランク量子論を延命させたアインシュタイン

アインシュタインというと「相対論」とくるのが世間の相場である．彼を世間的に超有名にした「1919年の一件」を演出したのも一般相対論の一つの実験的検証であった．世間のイメージは完全に相対論である．ところが彼のノーベル賞（1921年度のが1922年に発表）のサイテーションには相対論の文字は登場せず,「光電効果」という文字が登場する.「奇跡の年（1905年）」の三大論文の一つである光電効果を説明する光量子説を指している．

この光量子説は，1900年の黒体放射スペクトルの説明のために導入されたプランクの量子仮説に息を吹き込み，1925-26年のハイゼンベルグらによる量子力学への道を拓いたものである．実は1900年のプランク論文とアインシュタインの光量子説の間には誰も量子仮説を取り上げていない．プランク量子仮説を黒体放射以外の現象に広めて前期量子論につないだのが光量子説（光子，フォトン）である．プランク量子論を延命させた功績はアインシュタインにある．

前期量子論の展開は原子分子のスペクトルや固体電子論にプランク定数hが必須のものであることを認識させた．前期量子論の理論的な展開を年表で示すが，この中でもアインシュタインの業績は抜きん出ている．

1900年　プランク，黒体放射での量子仮説
1905年　アインシュタイン，光電効果，光子（フォトン）
1907年　アインシュタイン，比熱の量子論，音量子（フォノン）
1913年　ボーア，原子のエネルギー準位とスペクトル
1915年　ゾンマーフェルド，水素スペクトルの微細構造
1917年　アインシュタイン，放射確率A, B，誘導放出
1924年　ボーズ–アインシュタイン統計，BE凝縮，
　　　　ド・ブロイ，物質波
1925年　パウリ，排他原理
1926年　フェルミ–ディラック統計
1928年　ゾンマーフェルド，金属電子論

前期量子論で導入された諸概念はレーザーやトランジスターなどのハイテク分野で広く用いられている．特に，アインシュタインの1917年論文は確率というものを初めて量子論に導入したものであり，この放射確率を演繹的に計算するボーア–クラマース等の試みが1925年ハイゼンベルグ論文の動機となる．また「誘導放射」を発展させたのがレーザーである．光電効果の固体電子版が太陽電池であることを思い起こせば，現在のハイテクの隅々にアインシュタインの業績が埋め込まれている．

さらに，量子力学関係では次の批判の論文もある．

1935年　アインシュタイン–ポドロフスキー–ローゼン（EPR）論文．

第 3 章
解析力学と状態空間

解析力学には “問題の解法” と “情報学への接点” という二つの側面がある．前者は，[質量]×[加速度]=[力] というニュートンの運動方程式をデカルト座標でない一般化座標系（曲線座標および集団座標）を用いて解く新たな解法に関係している．また後者は，統計力学で活躍するように，運動の状態数という概念を通じて確率やエントロピーという情報学の概念を運動の力学に関係づける．これは更に力学過程と論理演算過程を関連づける糸口を提供している．

運動の状態がその中の一点で表現されるような状態空間が人工的に導入される．この状態空間での状態点の移動変換と座標変換の関係が考察され，座標の取り方に依存しないこの人工的空間の性質を見出していく．“座標系によらない” という性質は “幾何学的性質” と呼ぶこともできる．

3.1 最適選択理論としての解析力学

3.1.1 配位空間と最小作用原理

運動状態を表現する座標をデカルト座標から拡大する意味には二つの面がある．一つは曲線座標であり，もう一つは重心座標や相対座標のように多数の粒子の位置座標から再構成される集団座標であり，その表現法にはデカルト座標と曲線座標が混用される．このように力学の変数 q は必ずしも個々の粒子の位置座標ではなく，それ等から再構成されたものであり一般化座標と呼ばれる．こうした一般化座標で構成される抽象的な空間は配位空間と呼ばれる，N 個の粒子系の配位空間の次元は一般には $3N$ となる．系の記述には多くの変数が必要であるがここでは簡潔さのため添字を省略して話を進める．

個々の粒子のデカルト座標での運動方程式から変形して一般化座標での運動方程式を書き下すことは，不可能ではないが，煩雑で実用的でない．こういう問題解法に便利な手法をという動機のもとに開発されたのが最小作用原理である．この原理では，系の特性はラグランジアン $L(q,\dot{q})$ で与えられ，力学法則は

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}) dt \tag{3.1}$$

なる作用積分 I の値を最小にする軌跡を探す問題に還元される．

すなわち，配位空間の二つの端点，$q_1(t_1)$ と $q_2(t_2)$，をつなぐ様々な軌道のうちで「I が最小になる」軌道が力学運動の軌跡である，とするのがこの原理である．与えられた端点を結ぶある仮想的軌道を考えると，その軌道の q と $\dot{q}$ が決まり，この定積分の値が定まる．こうした無数の仮想的軌道の中で I が最小になるものが，現実の軌道であるというのである．運動を導く微分方程式はこれで導出されるから，運動方程式よりも上位の原理として最小作用原理がある．

$dQ/dt = F(Q)$ のように微分形で表現された運動方程式は時間的因果関係の表現になっている．すなわち，ある時刻の状態がその前後の時刻の状態と一義的に結びついているというメッセージを発している．それに対して最小作用原理では時間についての積分値が中心概念であるから端点から端点までの全履歴を問題にしている．さらに重要なことは運動方程式では許されない運動の軌道群を想定する原理になっていることである．因果関係ではなく，仮想的な運動の軌道群を想定した上で，その中から現実の運動を選び取っていく最適選択の原理に移行させている．物理的には，ずれた時に元に引き戻す仮想的な力を想定して語られる場合もあり，仮想仕事の原理と呼ばれる場合もある．

「因果関係」から「最適選択」への視点の変更の思想的背景としては，ライプニッツによる可能世界の中から最良の世界を神が選択するという議論などがあったとされる.「最小作用」とは労力が最小ですむ賢明な選択という含意である．微分形の運動方程式が発する「因果関係」のイデオロギーは唯一の存在しか許されないというものであるが，積分形の最小作用原理のそれは無数の可能世界の中で優勢なものを我々は見ているに過ぎないという背景世界の存在を想定したものになっている．量子力学では「最低」の数値に幅を持たせたようになっているとも言える．

3.1.2　変分原理と運動方程式

最小作用原理は様々な仮想的な軌道の中から最適なものを選び出す選択則である．現在多くの数理科学の分野に応用を持つ，評価関数を定めて最適化をするという数理的手法の嚆矢なのである．

実際には軌跡についての積分値を比較するのではなく,「最小」値を与える解が満たすべき方程式を導くのにこの原理は用いられる．ある解である軌跡 $q(t)$ があったとすると，それから微小だけ外れた軌跡 $q(t) + \epsilon u(t)$ での積分値の微小量 ϵ の一次に比例する項を計算すると次のようになる．ここでは $\delta q = \epsilon u(t)$ である．

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \delta L(q, \dot{q}) dt = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right] dt$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta q + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right) \right] dt$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta q \right] dt + \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right)_{t_2} - \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right)_{t_1} \right] \quad (3.2)$$

$$= \epsilon \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) u \right] dt. \quad (3.3)$$

(3.2) 式の第二項は，比較する様々な軌道の両端が固定されているから $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ であり，消えるのである．

「最小」である必要条件としてこの一次の項はゼロでなければならない．ずれ δI の ϵ についての展開が，一次がなく，二次から始まっていればそこが極値である．「最小」でもそれが満たされねばならないから，任意の u に対して $\delta I = 0$ であるためには，

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad (3.4)$$

が結論される．このような論法は変分原理と呼ばれる．こうして L で支配される運動の軌道は (3.4) 式を積分して与えられる．この式はオイラー–ラグランジュ方程式（E-L 方程式）と呼ばれる．

多くの場合，$L =$ [運動エネルギー] − [ポテンシャル・エネルギー] $= T - V$ の形である．一次元粒子の運動では

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \text{ から，運動方程式が } m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} \quad (3.5)$$

と導かれる．

3.1.3 等価ラグランジアン

L は運動方程式が導かれるように設定すればよい．いま，A, B を定数として

$$L \to L' = A + BL + \frac{dW(q,t)}{dt} \quad (3.6)$$

と変換した L' も同じ運動方程式を与える．例えば $L' = L + dW(q,t)/dt$ なら

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L'}{\partial q} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}} \frac{dW}{dt} \right) - \frac{\partial}{\partial q} \frac{dW}{dt} \quad (3.7)$$

で $\frac{\partial}{\partial \dot{q}} \left(\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial q} \dot{q} \right) = \frac{\partial W}{\partial q}$ だから，右辺の後半の二項は $\frac{d}{dt} \frac{\partial W}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \frac{dW}{dt} = 0$ と消し合うから，もし E-L 方程式が L に対して成り立つなら，L' に対しても成り立つのである．

同じ運動方程式を与えるという意味で L と L' は等価なラグランジアンであると呼ばれる．このように運動方程式からラグランジアンは一義的には決まらずに不定性が残るのである．

3.1.4 場のラグランジアンの変分

1.1.3 節で，多粒子系の極限として，場の運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V を与えたが，これらを用いて場のラグランジアンは

$$L = \rho S \int \ell(A, \dot{A}, A')dx. \tag{3.8}$$

ここで $\dot{A} = \frac{\partial A}{\partial t}$，$A' = \frac{\partial A}{\partial x}$ であり，

$$\ell(A, \dot{A}, A') = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2}C^2\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)^2 \tag{3.9}$$

はラグランジアン密度と呼ばれる．ここで扱っている場のラグランジアンは A を含まないが一般的には A が含まれる場合もある．

ℓ が A' を含むため，変分原理 $\delta\int Ldt = 0$ から導かれる E-L 方程式は変更を受ける．

$$\begin{aligned}
\delta I &= \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \delta\ell(A, \dot{A}, A')dxdt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial \ell}{\partial A}\delta A + \frac{\partial \ell}{\partial \dot{A}}\delta \dot{A} + \frac{\partial \ell}{\partial A'}\delta A'\right] dxdt. \qquad (3.10)\\
&= \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \left[\left(\frac{\partial \ell}{\partial A} - \frac{d}{dt}\frac{\partial \ell}{\partial \dot{A}} - \frac{d}{dx}\frac{\partial \ell}{\partial A'}\right)\delta A\right] dxdt \\
&\quad + \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \ell}{\partial \dot{A}}\delta A\right) + \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial \ell}{\partial A}\delta A\right)\right] dxdt. \qquad (3.11)
\end{aligned}$$

ここで時間的な端点での固定 $\delta A|_{t_1} = \delta A|_{t_2} = 0$ に加えて，空間的な端点での固定 $\delta A|_{x_1} = \delta A|_{x_2} = 0$ を課せば，次の E-L 方程式が結論される．

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \ell}{\partial \dot{A}} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial \ell}{\partial A'} - \frac{\partial \ell}{\partial A} = 0. \tag{3.12}$$

三次元に拡張すれば，ラグランジアン密度

$$\ell = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2}C^2\left[\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial A}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial A}{\partial z}\right)^2\right] \tag{3.13}$$

となり，ラグランジュ関数は $L = \int \ell(\dot{A}, A')dxdydz$，作用積分は $I = \int \ell dxdydzdt$ となる．これから E-L 方程式として

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - C^2\left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2}\right) = 0 \tag{3.14}$$

という場の波動方程式が導かれる．

3.2 位相空間による状態の表現

3.2.1 ルジャンドル変換と位相空間

まず L のルジャンドル変換によって次の様にハミルトニアン H を導入する.

$$H(p,q) = p\dot{q} - L(q,\dot{q}),\ \text{ここで}\ \ p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}. \tag{3.15}$$

p を q に共役な運動量と呼び，また p,q は互いに正準共役な関係にある変数である．$dH = pd\dot{q} + \dot{q}dp - (\partial L/\partial q)dq - (\partial L/\partial q)d\dot{q} = \dot{q}dp - (\partial L/\partial q)dq$ のように H の全微分を取ってみれば独立変数が p,q に変わっていることが分かる. ここで $\dot{q}$ は $\dot{q}(q,p)$ のように新しい独立変数の関数として一義的に決まることが前提になっている．その場合，H を L に戻す逆のルジャンドル変換も可能である.

この一義性を見通しよく議論するためにある関数 $f(x)$ の変数 x を α に変えるルジャンドル変換を次の様に定義する（力学との対応では $\dot{q} \to x, p \to \alpha, L \to f$）.

$$g(\alpha) = \max_{x}\{\alpha x - f(x)\}. \tag{3.16}$$

ここで $\max_x$ は，α を固定して，x を変えた時に $\{\cdots\}$ 内が最大になる x を採用するという意味である．この極値を取るという条件は $\{\cdots\}$ 内を微分してゼロが必要条件だから $\partial f(x)/\partial x = \alpha$ なる方程式の解 $\tilde{x}(\alpha)$ で x を入れ替えるという意味である．そしてもし単調関数なら，$\partial f/\partial x$ が α となる $\tilde{x}(\alpha)$ が複数個あることはない.「単調」とは $\partial^2 f/\partial x^2$ が定符号を意味し，プラスなら f は下に凸な関数を意味し，これがルジャンドル変換可能な関数の条件となる．この一般的定義では $f(x)$ は必ずしも微分可能が定義されていない特異点を含む凸関数でもルジャンドル変換は可能であり，また離散的な場合にも拡張できる．制御などの最適化問題では f や g に当たる評価関数はこのような特異点を含む凸関数に拡張して使用される．また，熱力学でのエントロピー S などの諸種の状態関数間の変換もルジャンドル変換である．これは S の凸関数性と関連しており，また相転移で不連続になる状態関数においても変換できる.

3.2.2 位相空間での変分原理

状態を表現する人工的な空間として，新しい変数 p,q を座標値とする位相空間（phase space，相空間ともいう）を導入する．配位空間では同じ q でも $\dot{q}$ が異なる多くの状態が一点で表現されているが，位相空間の一点は一つの状態と一義的に対応している．作用積分を位相空間上の積分で書けば

$$I = \int_{t_1}^{t_2} M(p,q)dt,\ \text{ここで}\ \ M(p,q) = p\dot{q}(p,q) - H(p,q) \tag{3.17}$$

となる．L を最適化選択の評価関数と見る視点を前に述べたが，それと同様に，位相空間 (p,q) の運動の課題は $I = \int_{t_1}^{t_2} Mdt$ を最大化する軌跡を求める問題と

見なすことができる．

いま配位空間で考えた場合と同様に両端で q を固定した変分を考えると

$$
\begin{aligned}
\delta I &= \int_{t_1}^{t_2} \delta[p\dot{q} - H(p,q)]dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p + \left(-\dot{p} - \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q \right] dt + p\delta q|_{t_1}^{t_2}
\end{aligned} \tag{3.18}
$$

となる．$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ であるから最後の項はゼロである．したがって変分原理から位相空間での運動方程式

$$
\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \tag{3.19}
$$

が導かれる．これは正準方程式とも呼ばれる．

配位空間の変分と違って，位相空間で p と q は対等な変数だから，変分を取る際の両端での固定条件を $\delta p = 0$ などに変えることもできる．$\delta p(t_1) = \delta p(t_2) = 0$ の条件の下では

$$
N = M - \frac{d}{dt} pq \tag{3.20}
$$

で定義された N を用いた作用積分

$$
I = \int_{t_1}^{t_2} N(p,q)dt \tag{3.21}
$$

の変分原理によって，正準方程式が導かれる．

3.2.3 運動方程式と正準変換

配位空間での座標変換では，変換のタイプを制限する条件は存在しなかった．しかし，位相空間では事情が少し違う．位相空間での座標変換では一般には p と q の混じったものになる．しかし運動方程式（正準方程式）をみると，符号の差があり，p と q の区別は明瞭に存在する．そこで，一般の座標変換 $p, q \to P, Q$ のうちで，P, Q も

$$
\dot{P} = -\frac{\partial K}{\partial Q}, \quad \dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P} \tag{3.22}
$$

という形を保持するある座標変換 $P = P(p,q,t), Q = Q(p,q,t)$ のみを考えることにし，これらを正準変換と呼ぶ．その上でその正準変換が満たすべき関係に着目していく．

変分原理で正準方程式を導く際の両端で固定する変数として $(q,Q), (q,P), (p,Q), (p,P)$ の四通りのタイプが考えられるが，以下では (q,P) 固定の変分を考える．先に述べた L の不定性を考慮すると，被積分関数 $M(p,q)$ と $N(P,Q)$ の間に

$$
M(p,q) - N(P,Q) = \frac{dW_2(q,P,t)}{dt} \tag{3.23}
$$

の関係があればよいことになる．ここで $W_2(q,P)$ は正準変換を規定するもので生成関数と呼ばれる．上式を書き下すと

$$\left(p-\frac{\partial W_2}{\partial q}\right)\dot{q}+\left(Q-\frac{\partial W_2}{\partial P}\right)\dot{P}+\left(K-H-\frac{\partial W_2}{\partial t}\right)=0 \qquad (3.24)$$

となるが，ここでは $\dot{q},\dot{P}$ は任意パラメータだから，次の関係が導かれる．

$$p=\frac{\partial W_2}{\partial q},\quad Q=\frac{\partial W_2}{\partial P},\quad K=H+\frac{\partial W_2}{\partial t}. \qquad (3.25)$$

いま $W_2=qP$ にとれば，$p=P, Q=q$ となり，これは恒等変換である．また $W_2=f(q,t)P$ にとれば，$Q=f(q,t)$ という配位空間の座標変換である．一例として $W_2=P(q-Vt)$ にとれば，$Q=q-Vt$, $p=P$, $K=H-VP$ となり，q から Q への変換はガリレオ変換であるが，運動量およびハミルトニアンの変換は自明ではない．

3.2.4 連続変換とその作用素

以上の準備の上に，ある連続パラメータで記述できる正準変換を考える．変換を特徴づけるパラメータが連続であれば，一般の変換は微小量変換の積み重ねで与えられる．いまパラメータの微小量を ϵ とし

$$W_2=qP+\epsilon G \quad \text{と書けば,}\quad p=P+\epsilon\frac{\partial G}{\partial q}, Q=q+\epsilon\frac{\partial G}{\partial P} \qquad (3.26)$$

となる．G はこの微小変換の生成演算子あるいは作用素と呼ばれる．ここでは ϵ の一次の変化量を問題にしているから $G(q,P)\sim G(q,p)$ であり，この正準変換による変化分は次のようになる．

$$\delta q=Q-q=\epsilon\frac{\partial G}{\partial p},\quad \delta p=P-p=-\epsilon\frac{\partial G}{\partial q}. \qquad (3.27)$$

ここで G のイメージを掴むため幾つかの例を列記する．

- $G=p_x$ とすれば，$\delta q_x=\epsilon$, $\delta p_x=0$ となり，$G=p_x$ は正準共役な変数 q_x の値を ϵ だけ変化させる．すなわち，粒子の位置変数のあるデカルト座標で測定した値が ϵ だけ変化したのだから，p_x は x 軸方向に粒子を ϵ だけ移動させる作用をする作用素なのである．
- $G=q_x$ とすれば，$\delta q_x=0$, $\delta p_x=\epsilon$．q_x は p_x の値を ϵ だけ変化させる．正準共役な変数は相互的な関係にある．
- $G=J_z=p_xq_y-p_yq_x$ とすれば，$\delta q_x=\epsilon q_y$, $\delta q_y=-\epsilon q_x$, $\delta p_x=\epsilon p_y$, $\delta p_y=-\epsilon p_x$ となり，J_z は z 軸周りに微小角度 ϵ だけ回転させる作用素である．
- $G=H$ とすれば，

$$\delta q=\epsilon\frac{\partial H}{\partial p},\ \delta p=-\epsilon\frac{\partial H}{\partial q}$$

となり，$\epsilon=\delta t$ にとれば，これらは正準方程式という運動方程式そのもの

である．ハミルトニアン H は時間方向に状態を移動させる作用素である．p や J との並びでいえば，H はエネルギーであるともいえる．

- 三次元空間の多粒子系の場合，位置の移動をさせる生成関数は

$$W_2 = \sum_i (q_{xi}P_{xi} + q_{yi}P_{yi} + q_{zi}P_{zi}) + \epsilon_x \sum_i p_{xi} + \epsilon_y \sum_i p_{yi} + \epsilon_z \sum_i p_{zi}$$

のように，三個のパラメータ $\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z$ で表すことができる．

3.3 変換理論としての解析力学

3.3.1 受動変換，能動変換

ここで「座標値の変換」を「移動させる」「回転させる」などと表現したが，座標変換に伴う「座標値 $(q,\ p)$ の変換」と見るなら，むしろ「座標系の原点を移動させた（並進変換）」「座標軸の方向を回転させた（回転変換）」と呼ぶべきものであるとも言える．また,「時間の原点をずらしたことによる座標値の変換」という言い方は，既に全時間で完成している軌道を前提にしており，その座標値との対応の変更を言っていることになる．その一方，正準方程式を運動方程式と呼ぶように,「H は粒子を移動させる作用素」,「H により生成される軌道」などと粒子に作用するものとしてイメージする場合も多い．このように，正準変換を座標系の取り替えに伴う受動的な表現の変更と見ることもできるし，物理的対象に作用して状態を実際に変える能動的作用と見ることもできる．

何れにせよ，運動量，角運動量，エネルギーといった物理量を能動的な作用素とみる視点を正準変換理論は導入している．従来，物理量というのは状態に応じてモノが所持している値という受動的なイメージであったが，状態を変化させるという作用素でもあるのである．作用素とは operator の翻訳語であるが，operation は演算とも訳される．本書では，厳密な区別はなしに，作用素，オペレータ，演算子などを用いることがある．ここで問題なのは，むしろ，物理現象記述の場合の日本語の語感として,「作用」といえば力やエネルギーを伴った「移動させる物理作用」を連想させ,「演算」といえば帳簿上の数字の書き換えに過ぎない印象となることである．オペレータはその中間であろう．そして「物理作用」か？「演算」か？この問いは量子力学において，より根源的なものへと繋がっていく．

後にも再論するが，もともと物理的対象を数理的に記述することの意味が自明ではない．例えば，速度という量はその粒子が所持するものか？座標系を設定して外から計測した観測値か？といった問いかけをされると人によって意見が違ってくる．ある人は「測定しようとしまいと粒子が所持している」といい，別の人は「何を測るかは観測者が設定する」という．この古典力学でも一義的でない見方の差は量子力学でさらに拡大されることになる．

3.3.2 交換関係

位相空間上の関数の軌道に沿った時間変化は正準方程式を使って

$$\frac{dF(p,q,t)}{dt} = \frac{\partial F}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial F}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial F}{\partial t} = \left(\frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}\right) + \frac{\partial F}{\partial t}$$

$$= [F,H] + \frac{\partial F}{\partial t}. \qquad (3.28)$$

ここでポワッソン括弧式 $[A,B]$ という表式を導入している．これは次の様な性質を持つ：$[A,B] = -[B,A]$, $[A,A] = 0$, $[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]] = 0$, $[q,p] = 1$, $[q,q] = [p,p] = 0$, など．

時間変化は H による正準変換の一種に過ぎないという見方を裏付けるように，一般の連続変換の正準変換に対しても

$$\delta_\epsilon F(p,q) = \frac{\partial F}{\partial q}\delta_\epsilon q + \frac{\partial F}{\partial p}\delta_\epsilon p = \epsilon\left(\frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial G}{\partial q}\right) = \epsilon[F,G] \quad (3.29)$$

でポワッソン括弧式で書ける．いま，G を並進変換や回転変換にとり，それらの変換で H が変化しない，すなわち $\delta_\epsilon H = 0$ なら，$[H,G] = 0$ である．そしてこれから，(3.28) 式によれば，$\partial G/\partial t = 0$ として，変換の生成子 G に対する $dG/dt = 0$ という G の保存則が導かれる．後述（3.4 節）のネーター定理と関連している．

交換関係の威力は正準変換によりポワッソン括弧式の同形性，$[F,G]_{qp} = [F,G]_{QP}$，が保たれることである．ここで

$$[F,G]_{qp} = \frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial G}{\partial q},\ [F,G]_{QP} = \frac{\partial F}{\partial Q}\frac{\partial G}{\partial P} - \frac{\partial F}{\partial P}\frac{\partial G}{\partial Q}. \quad (3.30)$$

このことは，正準運動方程式が正準変化の一種に過ぎないという認識に立って正準変換の要請自体を一般の G にも拡張して考えれば，

$$\delta_\epsilon F = \frac{\partial F}{\partial q}\delta_\epsilon q + \frac{\partial F}{\partial p}\delta_\epsilon p = \frac{\partial F}{\partial Q}\delta_\epsilon Q + \frac{\partial F}{\partial P}\delta_\epsilon P \qquad (3.31)$$

から自明である．あるいは逆に,「ポワッソン括弧式の同形性を保持する変換が正準変換である」というように，正準変換の定義としてもよい．一般の変数変換に対して $[A,B]_{qp} = [Q,P]_{qp}[A,B]_{QP}$ だから，この定義は次の要請と同じになる．

$$[Q,P]_{qp} = 1. \qquad (3.32)$$

次に述べるように，座標変換の式から直接これを確かめることもできる．$W_2 = Pf(q)$ の場合，座標変換は $Q = f(q) = Q(q)$，$p = P\partial Q/\partial q$．微分の変数を下記のように書き換えていく．

$$\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} = \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial A}{\partial Q} + \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial A}{\partial P}\right)\left(\frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial Q} + \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial P}\right)$$

$$= \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial A}{\partial Q} + \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial A}{\partial P}\right)\frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial Q}. \tag{3.33}$$

ここで $\partial P/\partial q = 0$ を使った．同じように計算を進めて

$$[A,B]_{pq} = \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}\left(\frac{\partial A}{\partial Q}\frac{\partial B}{\partial P} - \frac{\partial A}{\partial P}\frac{\partial B}{\partial Q}\right) \tag{3.34}$$

となるが，一方，座標変換式から $\partial P/\partial p = 1/(\partial Q/\partial q)$ だから，最終的に $[A,B]_{qp} = [A,B]_{QP}$ となる．

3.4 ネーターの定理と保存則

古典力学を解析力学の形式に書き直すことによって新たに見えてきた法則性として対称性と保存則の結びつきがある．1918 年頃に，一般相対論の考察の中で，女性数学者のネーターが気づいたものである．

3.4.1 変換に対する不変性と最小作用原理

$q \to q + \delta_\epsilon q$ の変換に伴う L の変化分は，E-L 方程式が成立する下では

$$\delta_\epsilon L = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta_\epsilon q\right) \tag{3.35}$$

となる（(3.2) 式）．力学の最小作用原理の $\delta I = 0$ であるから，不変性は必ずしも $\delta_\epsilon L = 0$ を要求していない．この変化分 $\delta_\epsilon L$ が等価ラグランジアン $(L' = L + dW(q,t)/dt)$ の不定性に吸収できればいいのである．すなわち $\delta_\epsilon L = \epsilon dF/dt$ なら

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta_\epsilon q - \epsilon F(q,t)\right) = 0. \tag{3.36}$$

いま全体として孤立した多粒子の系を考え，相互作用は互いの距離で決まっているとする．この場合，デカルト座標系の原点をずらす並進変換と座標軸の方向を変える回転変換に対して $\delta_\epsilon L = 0$ である．したがって，$x \to x + \epsilon$ に対しては，粒子の添字 a について和を取って

$$\sum_{(a)}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{x(a)}}\delta_\epsilon q_{x(a)}\right) \to \left(\sum_{(a)} p_{x(a)}\right)\epsilon \tag{3.37}$$

となり，x 方向の全運動量 $\sum p_{x(a)}$ が保存するとなる．また z 軸まわりに微小角 ϵ だけ回転させたとすると，$\delta x = -\epsilon y$, $\delta y = \epsilon x$ だから

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta_\epsilon q \to \epsilon(-p_x y + p_y x) = \epsilon J_z \tag{3.38}$$

となり，この変換による不変性は z 方向の角運動量保存を表す．時間座標原点の変換 $t \to t + \epsilon$ でも，L が t を含まなければ，$\delta_\epsilon L = 0$ である．この場合は，E-L 方程式を用いると

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\ddot{q} = \dot{q}\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\ddot{q} = \frac{d}{dt}(p\dot{q})$$

だから，

$$\frac{d}{dt}(p\dot{q} - L) = 0 \tag{3.39}$$

となり，エネルギー $E = p\dot{q} - L$ の保存則が導かれる．

$\delta_\epsilon L$ がゼロでない例はガリレオ変換に対する不変性である．$x \to x + \epsilon t$ に対して，$\delta_\epsilon L = \epsilon m\dot{q} = \epsilon m dq/dt$, $\delta_\epsilon q = \epsilon t$ であり，$(pt - mq)$ が保存する．孤立した多粒子系については

$$t\sum_{(a)} p_{x(a)} - \sum_{(a)} m_a q_{x(a)}. \tag{3.40}$$

いま重心座標を $X = \sum_{(a)} m_a q_{x(a)}/M$, $M = \sum_{(a)} m_{(a)}$ と書けば，

$$tP - MX \tag{3.41}$$

が保存量となり，重心が一定速度で運動することを意味する．

この関係は古典と量子の関係を考察する際にも押さえておかねばならない．量子での力学の特徴は Ψ に対するシュレディンガー方程式では H にとどまり運動方程式を用いないことである．アインシュタインは「量子力学には加速度がない」と言っているが，軌道も存在しないのである．しかし，物理学の基本法則のようにいわれるエネルギー保存や運動量保存は，ネーターの定理の構成から明らかなように,「E-L 方程式に沿って運動する場合に保存される」となっている．したがって，軌道が消失する量子力学での保存則の意味も変わらざるを得ないことになる．

3.4.2 一次元場の理論と粒子運動のシュレディンガー方程式

場の力学での変数 $\phi(x,y,z,t)$ において，x,y,z は添字のようなものでその取り方は全く任意であると述べたが，その際でも時間 t は別扱いにした．場の力学の変数は場では $\phi_{x,y,z}(t)$，粒子では $q_A(t)$ であるという言い方である．いま，この逆に x,y,z と t を同格に見ると，ϕ は 1 + 3 次元空間の場，q_A は 1 + 0 次元空間の場と見なせる．粒子を区別する添字 A は場の種類の区別に当たる．ここで，粒子の力学を 1 + 0 次元空間の場の理論と見てみる．

q と t の関係は物理的に明確な関係にある．t は空間座標のような単なる空間の点を区別するための符丁ではない．例えば $t' = f(t)$ のような一般の座標変換をすると力学の方程式の姿は一変する．その一方で，場の視点に立てば座標はあくまでも添字であるべきだとなる．ここでの解決法は t も q と同等な変数と見なすことである．すなわち，座標 τ の一次元空間上の場 $t(\tau), q(\tau)$ を考えるのである．

そう考えると作用積分は次のようになる．

$$I=\int t'L\left(q,\frac{q'}{t'}\right)d\tau=\int \bar{L}d\tau,\ \text{ここで}\ \ t'=\frac{dt}{d\tau},\ q'=\frac{dq}{d\tau}. \tag{3.42}$$

次にこれからハミルトニアンを構成すると

$$\bar{H}=p_t t'+pq'-\bar{L}=t'(p_t+h(q,p)) \tag{3.43}$$

となる．そして，t に正準共役な運動量 $p_t=\partial\bar{L}/\partial t'=L-pq'/t'$ をこの表式に代入すると $\bar{H}$ は恒等的にゼロになる．すなわち

$$p_t+h(q,p)=0 \tag{3.44}$$

という拘束条件が導かれる．

ここで古典ハミルトニアンからシュレディンガー方程式を作る際に，q に正準共役な変数 p を $p\to(\hbar/i)(\partial/\partial q)$ に置き換えたように，t に正準共役な変数 p_t を $p_t\to(\hbar/i)(\partial/\partial t)$ に置き換えると，この拘束条件を Ψ に対する拘束条件

$$\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}+h\left(q,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\right]\Psi(q,t)=0 \tag{3.45}$$

であると見なすと，シュレディンガー方程式が導かれる．

力学の拘束条件には必要条件だが十分ではないというイメージがある．もともと保存則を用いて変数の数を減らす手法（サイクリック座標など）から数を減らさずに対称性を保持した形で拘束条件を課すのである．だから減った変数の解を出す問題は拘束条件に代替えされずまだ残っているから十分ではない気になる．この視点でみると拘束条件で状態ベクトルが決まるという上述の論法には違和感が残るが，このディラックの「拘束系の量子力学」は一般相対論，ゲージ理論，弦理論の量子化で活躍しているものである．(3.45) 式はそうした拘束条件量子化の最も簡単な一例なのである．

コラム3 アインシュタインの A と B

エネルギー密度スペクトルが $u(\omega)$ の放射の中に置かれた原子の集団を考える．エネルギーが E_1 の第一準位にある原子の個数を N_1，E_2 の第二準位にある個数を N_2 とする．各準位にある原子数は，準位間のエネルギー差に等しい放射 $(\hbar\omega = E_2 - E_1)$ と作用して，次のように変化する．

$$\frac{d}{dt}N_1 = -B_{12}u(\omega)N_1 + B_{21}u(\omega)N_2 + A_{21}N_2,$$

$$\frac{d}{dt}N_2 = B_{12}u(\omega)N_1 - B_{21}u(\omega)N_2 - A_{21}N_2.$$

$d(N_1 + N_2)/dt = 0$ であり，全原子数 $(N_! + N_2)$ は一定である．ここで A_{21}, B_{12}, B_{21} は自発放出 (spontaneous emission) 係数，吸収 (absorption) 係数，誘導放出 (stimulated emission) 係数と呼ばれる．$\tau = 1/A_{21}$ は第二準位が第一準位に脱励起する平均寿命である．例えば N_1 の変化は [（放射を吸収して第一準位から遷移する減少）＋（放射による誘導放出で第二準位から遷移する増加）＋（第二準位からの自発放出での増加）] という三つの遷移で成立している．

原子数が変化しない放射との平衡状態を考えると

$$B_{12}u(\omega)N_1 = B_{21}u(\omega)N_2 + A_{21}N_2$$

という条件が得られるから $u(\omega)$ は

$$u(\omega) = \frac{A_{21}N_2}{B_{12}N_1 - B_{21}N_2} = \frac{A_{21}}{B_{21}}\frac{1}{\frac{B_{12}}{B_{21}}\frac{N_1}{N_2} - 1}$$

という関係が得られる．

ここでこの関係を黒体放射

$$u(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

と熱平衡にある原子数の分布という特殊な場合に適用してみる．個数比は温度 T でのボルツマン分布に従うから

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{e^{-E_1/kT}}{e^{-E_2/kT}} = e^{(E_2-E_1)/kT} = e^{\hbar\omega/kT}.$$

これと上式を比較すれば，次のような一般的な関係が得られる．

$$B_{12} = B_{21}, \quad \frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}.$$

すなわち，誘導放出が必然であること，また比 A_{21}/B_{21} が $\hbar$ に比例していることが分かる．

なお黒体放射のスペクトル $u(\omega, T)$ をすべての ω について積分すれば

$$u(T) = \int_0^\infty u(\omega, T)d\omega = \frac{4}{c}\sigma T^4.$$

ここで σ はシュテファン–ボルツマン定数と呼ばれる．

コラム4　主観確率と客観確率

数学は現実社会での必要性から生まれたが，確率は複数の選択肢からの選択を合理化する試みである．選択をめぐる不安解消に名案はなく，古来，人々は占い，御託宣，悟り，帰依，決断，結果責任，投票，民主主義，リスク分散，などなど，さまざまなものに頼ってきたが，確率もその系譜に連なる．

確率には客観確率と主観確率の二つがある．

- 客観（認識者と無関係に実在するもの）
- 主観（認識者との関連で初めて登場するもの）
  - 機械の操作
  - 政策・経営の立案
  - 信念の形成・強化

通信での雑音除去や人工知能での選択のように，確率で推論して機械に「行動の選択」を指示する技術は情報科学の精華である．機械にはこれで満点であり，宝くじの賞金金額や保険料を決める「政策・経営の立案」でも今や頼れる数学である．個人の「信念の形成・強化」には何時迄も頼れるものはない．

確率を未来・過去，非決定・部分情報，主体・客観の三つの次元で見てみる．降水確率は未来確率でDNA鑑定は過去確率である．いずれの場合も一義的推論の代わりに確証度を数字で表現する．ここでは確率が推論する主体が持つ情報の部分性・不完全性に由来するものなら未来確率と過去確率は質的に対称的である．このように推論主体の意図や部分情報を基礎にするのが主観確率である．ベイズ推論やゲーム理論などの確率である．

他方,「主体」を取り除いた客観世界では過去には唯一の正解があり未来は未決定である．だから，過去確率は主体の無知度状態の表現で，未来確率は未決の度合いの表現となり，過去・未来の対称性は破れる．しかし「正解は分からないが既にある」というお呪いは推論操作に影響しないが，異なった世界像をもたらす.「既にある」に対峙するのが「過去の制作（ポエーシス）」論であり，「恐竜の骨が過去を制作した」という．しかし客観派は「それは過去に具体的な中身が詰まったということで，中身がまだなくても過去自体は実在だ」と言う．そこには中身が全くない存在があるという飛躍がある．これは「ゼロの発見」にあたる飛躍である．

客観確率の根拠として，根源的ランダムさを想定する．ただ，気体運動論の分子カオスのように部分情報記述に由来するランダム，あるいは全体性の確定困難に由来する定義不可能性などと単純ではない．数学にのるランダムは魑魅魍魎の完全な非決定ではなく，大数事象の相対頻度としての確率法則に限定される．全体を囲い込んだ飼いならされたランダムである．現実には，等確率とする根元事象まで還元するためのパラメータの数という，数学に収まらない難問を抱えており，各領域での確率記述の有効さはこの処理の巧拙に依存する．

第 4 章
状態空間と情報量

運動は位相空間での正準変換の一種と見なされ，この変換によって不変な幾何学的量（座標の取り方に依存しない量）が定義される．この位相空間の体積に相当する幾何的量が情報量の測度を与えるのである．この点はまた量子力学の身分を考察する際にも特に重要である．

4.1 なぜ正準変換なのか？：リウヴィユ定理

位相空間での一般の座標変換の中から正準変換を選び抜いた理由は「正準方程式の形が保持される」「ポワッソン括弧式が同形である」などという如何にも形式的なものである．しかしこれにはもう少し深い意味がある．それは，いま位相空間にある領域を取り，その中の点を正準変換によって新たな領域に移した場合，この領域の体積は変化しないという著しい特徴である．これはリウヴィユ定理と呼ばれる．いかなる形状の有限の領域に対しても成立する．

正準変換で結びついている領域 $\mathrm{A}(p,q)$ と領域 $\mathrm{B}(P,Q)$ を考える．体積は各々 $\int_A dpdq, \int_B dPdQ$ であるが，これらは座標変換の関係として

$$\int_B dPdQ = \int_A Jdpdq \tag{4.1}$$

で結ばれている．ここで J は座標変換に伴うヤコビアンである，そして実は J が $[Q,P]_{qp}$ そのものなのである．すなわち

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial Q}{\partial q} & \frac{\partial Q}{\partial p} \\ \frac{\partial P}{\partial q} & \frac{\partial P}{\partial p} \end{vmatrix} = [Q,P]_{qp}. \tag{4.2}$$

位相空間というのは人工的に構成された空間であるから，物理的な実在である三次元ユークリッド空間の性質をそのまま持ち込むのは間違いである．正準変換に付与された性質が成立するという要請で逆に位相空間の性質が定められているのである．例えば2点間に距離が導入できるリーマン空間ではない．し

たがってリウヴィユ定理でいう面積の意味も心配になるが，確かにより正確にこの定理でいう面積の意味も新たに定義される必要がある．そういう数学的枠組みは，ポワッソン括弧式を中心概念とした，ポワッソン多様体論として厳密に定式化されており，リウヴィユ定理はそのまま正しい．ちなみに，2 点間の距離が定義されている空間はリーマン多様体と呼ばれるが，配位空間はリーマン多様体である．

ポワッソン多様体というのは各点にベクトル（一般的にはテンソル）が配置された空間である．我々は素朴にベクトルの“長さ”とかいうが，これは他の点をも巻き込んで初めて定義される 2 点間の距離とは意味が違う．リウヴィユ定理でいう面積（一般には体積）とはこのベクトルの“長さ”に相当するものである．ベクトルの“長さ”は他の点を巻き込まないで，一点に自在する“長さ”である．リウヴィユ定理にいう有限領域の面積も，各点に自在する“面積”という量を加算した（積分）ものと考えればよい．一点にある二つのベクトルの外積の絶対値がベクトルが構成する平行四辺形の面積であるという時の面積に当たるもの，と考えればよい．

G が位相空間上の正則な関数であれば（微分値が確定している），各点を通過するのは一本の軌跡であり（なぜなら接線が一義的に定まってるから），交差することがない．このため，領域 A の境界の点は領域 B の境界の点に移動し，内部から出て行くことも入ってくることもない．したがって，各領域にわたる面積量が保存するのである．

4.2　モノの状態に関する情報（帳面）

ここで現象を数理的に記述することの意味を再考してみる．考察の対象（モノ）自体が諸量を数字で所持しているはずはないから，数字化されるのはモノの諸量（変数）の測定（写像）によってである．数字化の仕組みは測定の側にある．しかし，測定も対象と同質の現象だから，そこでも現象が自然に数字に化けるものではない．数字化には現象を数字に変えようとする主体（観測者）抜きには考えられない．観測者が，常に標準状態に戻すなどの制御ができる基準現象を用意して，その繰り返しの回数で数に変えるのである．

長年にわたるこの測定現象制御の蓄積と測定機器の高度化によって，現在は，この数字化の原点から遠い地点にいるが，この数字化の意味は忘れてならない．そして数理的に現象を法則化するという営みは，観測主体が認識する測定値あるいは，それとの対応関係が明確な量の数学的関係を理論化することである．数字化された対象の情報はすでに帳簿（データ）という存在である．だから，数理的法則で記述するとは，こういう帳簿上での数字の組の操作，すなわち演算を行うことである．現象の時間変化や幾つかの現象の比較も帳簿上の存在との対応で記述される．

モノと帳簿が別物だと位置づけると両者の関係に目がいく：写像は一対一か？帳簿の記述は包括的か部分的か？帳簿の様式は何で決まる？帳簿で扱うのは情報か写像値か？

いったん数理の世界に移したからには，その世界での存在感のある新概念も写像量と同等な実在性がある．例えば，平均値とか重心の位置といったものは一次量から二次的に構成された量といえる．しかし理論の中ではその位置づけは一次量と同等であるが，理論を離れた意味ではその存在論的意味は自明でない．

存在論にはいくつかの哲学的論点がある．まず，それが自存的にあるのか，他者との関係性において存在があるのか，がある．また，普遍的な一般存在と偶有的な個物の存在がある．こうした古来からの形而上学的存在論に新たな一石を投じたのは近代の実存的存在論である．これは近代の始まりを彩った経験主義やカント主義（概念構成主義）の認識論的の哲学の潮流の後を受けて登場したものである．認識論的主体と実存的主体の差は前者が傍観者的であるのに対して，後者は投企する意図を持つ行動人であることである．量子力学において観測・測定が理論構成の中核をなしていることは実存的存在論の傾向を有しているといえる．

数学は言語と同様に存在論的には実在である．外界の物質世界，間主観的精神世界，それと同等な実在性を有する第三の世界があると考えた方がいい．それが実在の意味であり，数学も，論理だけを支えに他の世界から切り離されても形式的に構成できる存在だとは考えない．二十世紀初頭にあった数学の形式主義と直観主義の論争は数学を取り巻く学問状況と独立に論じられない．そして，量子力学がこの連関での重要な試金石であるといえる．

4.2.1　情報の測度，熱力学，エントロピー

数理的に扱う場合の情報とは「… である」という中身ではなく，列記された可能性の内の「これである」という指差しをすることである．N 個ある可能性が一つに確定したことを情報量 N が得られたと数量化（数字化）するのである．得られた情報の貴重さは可能性の多い（不確実さが大きい）中から確定することの方が高いという数字化をするのである．また，この可能性の数の逆数 $1/N$ を確率 p と呼ぶ．可能性の視点で見ると N が大きければ p は小さい．

いま互いに独立に起こる二つの事象（可能性の数は各々N_1，N_2）を合わせた記述をすることを考えると，可能性の総数は N_1N_2 となるが，ここで「独立な事象の合成系の情報量は個々の情報量の和である」となる数量化をするには，情報量の定義として $\log N$ または $-\log p$ に比例する量を採用することになる．こうして，確率が $p_1, p_2, \cdots, p_n (\sum p_i = 1)$ の合成系の平均情報量として次の様なエントロピーが導入される．

$$H = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i. \tag{4.3}$$

これはシャノンのエントロピーとも呼ばれる．1948 年に情報通信の効率化のために情報量を数字で表す測度を目指して導入されたものである．log の関数形は凸性を有することからも採用される．これは，事象の区別の仕方をより大まかにした記述の平均情報量は増加する（不確かさがより大きくなるから，得られる情報量はより大きい）という性質を表現できることである．確かに，区別を全廃して均一系として扱う場合 $(p_1 = p_2 = \cdots = p_n)$ に H は最大になる．

フォン・ノイマンは，当初から，シャノンの H を熱力学で既に定着しているエントロピーと同じものだと看取してエントロピーと呼んだ．熱力学のエントロピー S は，分子運動論の統計力学により，ボルツマンによって

$$S = \log W,\ W = \text{状態数} \tag{4.4}$$

という意味が与えられた（ボルツマン係数 k は省いてある）．量子統計力学までいって分かった現在の認識では，気体の状態の数とは

$$W \sim \left[\frac{(V/N)\bar{p}^3}{h^3}\right]^N, \tag{4.5}$$

$h = 2\pi\hbar,\ \bar{p} = (2mkT)^{3/2}$，で大よそ与えられる．[ ] 括弧内の分子は一個の粒子当たりの位相空間の体積に相当し，これを識別できない最小作用単位 h^3 で割って状態数になる．熱力学では S の変化分のみを問題にしたから，位相空間の体積に比例するで十分だった．この数はマクロな条件（温度が T で一個当たりの体積が N/V）の下での取り得る状態の数（可能性の数）である．そしてこの独立な系が N 個あるから総数はその N 乗となる．H との対応でいうと，まず S は H が最大になる均質系の場合で，また H は粒子一個当たりのエントロピーにあたる．例えば，常温の空気 $1\mathrm{m}^3 (N \sim 10^{23}, T \sim 300\mathrm{K})$ の 1 粒子の状態数 $(W^{1/N})$ は 10^{27} となる．

力学法則では説明できない熱力学第二法則 $(\delta S \geq 0)$ の意味は凸性関数で S を表示していることと同等である．半々に仕切られた等温な容器の各部分に N_1，N_2 個の粒子がはじめ状態 I にあったとする．その仕切りを取ると全体積に $N_1 + N_2$ 個の粒子という状態 II に変わる．比較に有意な部分だけ記せば，S は

$$S_I = N_1 \log \frac{V}{2N_1} + N_2 \log \frac{V}{2N_2},\quad S_{II} = (N_1 + N_2) \log \frac{V}{N_1 + N_2}. \tag{4.6}$$

そして確かに $S_{II} \geq S_I$ である．しかしこの不等式の解釈には大きな幅が生じる．物理学では拡散が起こって一様な状態に時間的に移行するからという理由をあげる．その一方，この不等号は単に状態の区別をどう取るか（大まかに取るか，細かく取るか）の差に過ぎないともいえる．しかし物理学での「一様」というのもある基準での「一様」（区別がつかない）という意味であり，区別の

恣意性に基づく点では共通している．いったん大まかに記述すると，細かに区別する記述には戻れない．

4.2.2　リウヴィユの定理と情報量の保存

解析力学の話の中に急に情報量という異物が入り込んできた感があるが，状態を表現する位相空間を通して力学が熱力学・統計力学・量子力学といった確率を議論する物理学に展開し，さらにエントロピーを通じて情報の科学との接点ができているのである．力学過程（一般には正準変換）では位相空間の体積が保存するということは，その保存量にもっと実体的な物理的意味を与えることが要請されているといえる．物理学においてエネルギーや運動量の保存を理由にして，それらを質量や電荷のような物理量並に，力学過程で様々に配分は変わるが全体として保存する実体性をもった量として受け取られている．それらと差別しない実体的な量であるという見方が要請されている．

しかし，多くの場合，物理学においては，登場する物理量に直観的理解に馴染むものから順にランクづけをしている．空間中の運動を記述する時間空間，質量や電荷，などが第一ランク，エネルギーや運動量（角運動量）は第二ランク，そして位相空間の体積などは第三ランクであろう．こういうランクづけは，いったん現象を数理的データに置き換えたら，あとは数学のルールで変換されたものであるから対等なものであるべきだという考え方に反するものである．と同時に，ここにも前にも論じた数学というものの存在論的位置づけが絡んでくる．

もし位相空間の体積を質量並みの実体性を持つと考えるなら，状態の区別（グルーピング）と確率という常習的なものと枠組みに載せることができる．$\hbar$ の発見は有限区別の絶対性を発見したものともいえる．そして有限区別の情報記述は必然的に確率記述になるのである．またここで言う確率とは，ランダム現象に由来する確率ではなく，情報量の大小を扱う際の蓋然性の概念のことである．解析力学の位相空間は力学状態の測度を与えることであり既に統計力学の不可欠な基礎となっている．しかし，マクロの平均的な姿の背後に真の姿があるという思い込みがあるために，その記述を現象論的，二次的，便宜的と見なす傾向が横溢している．ここにも，物理学の理論が提示している数理的構造を無視した実感主義の残渣がみられ，これらの実感主義の傾向が量子力学に持ち込まれることで混乱が生じるのである．

4.3　行列力学と波動力学

現在の量子力学の数理的構造は，前期量子論の作用積分量子化の時代を経て，ハイゼンベルグの行列力学，シュレディンガーの波動方程式に続きボルン–ヨルダン，ディラック，ノイマンらによって，オペレータと状態ベクトルを二本柱

とする枠組みが完成した．量子力学への飛躍に際して解析力学が歴史的に果たした役割をみておく．

4.3.1 ハイゼンベルグの行列力学

プランクの $\hbar$ 導入以後の前期量子論による原子スペクトル説明での成功を踏まえて，量子力学への飛躍のきっかけとなった問題は原子からの放射率であった．原子内の電子が状態 E_n から E_m に遷移する際にエネルギー $\hbar\omega_{nm} = \hbar(\omega_n - \omega_m)$ の光子を放出されるという関係は正しいが，この遷移の動的過程を記述する理論の空白状態が続いていた．これに楔を打ち込んだのが 1917 年のアインシュタインによる遷移確率（自然放出率 A_{nm} と誘導放出率 B_{nm}）の現象論的な導入である（コラム 3）．放射性原子核の崩壊率の記述に既に導入されていた手法を持ち込んだのである．

一方，古典論では加速度運動する電子の放射率は $P = (2e^2/3c^3)\ddot{q}^2$ で与えられている．フーリエ理論から変動が一般に ω の定まった定常振動（そのラベルが n や m）の重ね合わせとして表現できることがあり，対応論的には

$$P_{nm} = A_{nm}\hbar\omega_{nm} = \frac{2e^2}{3c^3}\omega_{nm}^4 |q_{nm}|^2 \tag{4.7}$$

という，遷移確率とフーリエ成分の関係を想定する．前期量子論で知られている結合則 $\omega_{nm} = \omega_{nj} + \omega_{jm}$ を維持するには，古典的には意味不明な q_{nm} の演算則を

$$(q^2)_{nm} = \sum_j q_{nj} q_{jm} \tag{4.8}$$

とせねばならない事実から，これらは作用素の行列表現であることにハイゼンベルグらは気づく．こうしてここに登場する q, H といった物理量はスカラー量ではなく，作用素（オペレータ，演算子）間の関係として再定義されることになるのである．

$\hat{q} \to \left[q_{nm} e^{i\omega(nm)t}\right]$ の対応を運動方程式にまで拡げると

$$\left(\frac{\partial q}{\partial t}\right)_{nm} = i\omega(nm) q_{nm} e^{i\omega(nm)} = (E_n - E_m) q_{nm} e^{i\omega(nm)}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{q} - \hat{q}\hat{H}\right)_{nm}. \tag{4.9}$$

ここで $H_{nj} = E_n \delta_{nj}$ であるから，

$$(Hq - qH)_{nm} = \sum_j (E_n \delta_{nj} q_{jm} e^{i\omega(jm)t} - q_{nj} e^{i\omega(nj)t} E_m \delta_{jm}) \tag{4.10}$$

という結合則を使っている．運動方程式 $dq/dt = \partial H/\partial p$ を使って

$$\hat{H}\hat{q} - \hat{q}\hat{H} = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}}.$$

作用素間の交換関係を $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ と書くと，古典交換関係 $[F,q]=-\partial F/\partial p$ を考え合わせると

$$[\hat{F},\hat{q}]=-i\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{p}} \tag{4.11}$$

が示唆され，$\hat{F}=\hat{p}$ と置けば，

$$[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar \tag{4.12}$$

となる．現在，正準方程式で与えられる古典力学系の量子力学への移行はこの方程式を基礎にすることになっている．

4.3.2 H-J 方程式とシュレディンガー方程式

シュレディンガーの波動方程式は古典力学から演繹的に導かれたものではないが，シュレディンガーがこの方程式を発見する際に跳躍台にした方程式がある．それは解析力学におけるハミルトン–ヤコビ方程式（H-J 方程式）である．これまで見過ごしてきた正準変換 (3.25) 式の中での H から K への変換に着目する．ここで変換関数 W_2 を $K=0$ となるように選ぶのである．すると，正準方程式は $\dot{P}=0,\dot{Q}=0$ となるから P,Q は定数となり，$P=\alpha,Q=\beta$ とすれば，$\beta=\partial W_2/\partial\alpha$ となる．$K=0$ にとったハミルトニアンの変換式が次の H-J 方程式である．

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H\left(\frac{\partial S}{\partial q},q\right)=0. \tag{4.13}$$

ここで $W_2(q,P,t)$ を $S(q,\alpha,t)$ と書き，またこれが配位空間上の方程式であるから $p=\partial S/\partial q$ を用いた．S がこの方程式の解とすると

$$\frac{dS}{dt}=\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial S}{\partial q}\dot{q}=-H+p\dot{q}=L,\quad \text{したがって } S=\int Ldt \tag{4.14}$$

となり，S は最小作用原理に登場した作用積分 I そのものになっている．

多次元の配位空間を考えて，S が一定にとどまる変位を $\Delta\boldsymbol{q}$ とすれば

$$S(\boldsymbol{q}+\Delta\boldsymbol{q})=S(\boldsymbol{q})\ \text{だから}\ \nabla S\cdot\Delta\boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}\cdot\Delta\boldsymbol{q}=0 \tag{4.15}$$

となる．すなわち，運動量が $S=$ 一定の面に垂直な方向を向いている．ド・ブロイの電子の波動説（1924 年）が注目されていたこともあって，シュレディンガーはここで $S=$ 一定の面を位相一定の波面と考える着想を得たのである．そこで S を位相とする波動を表す関数 Ψ を考えると

$$\Psi(q,t)=e^{iS(q,t)/\hbar}, \tag{4.16}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\Psi,\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial q^2}=\left[-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2+\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial q^2}\right]\Psi. \tag{4.17}$$

これらをシュレディンガー方程式に代入すれば S は次の方程式を満たすことに

なる．

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2+V-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial q^2}. \tag{4.18}$$

ここで $\hbar\to 0$ の古典極限を取った方程式は H-J 方程式 (4.13) 式である．シュレディンガー方程式自体は古典力学から演繹できるものでないが，$\hbar\to 0$ で古典力学に結びつくという飛躍である．作用積分量子化の手法（4.3.3 節に後述）によって，ボーアが導いた水素原子の離散的なエネルギー準位を導出することで，シュレディンガー方程式自体の検証はなされた．

自由運動の場合は $S=px-Et+c$ (定数) で H-J 方程式は $E=p^2/2m$ を意味する．そしてこの S の波動関数は

$$\Psi\sim e^{iS(s,t)/\hbar}=e^{i(px-Et+c)/\hbar}=e^{i(kx-\omega t+\phi)} \tag{4.19}$$

という平面波となる．ここで $p=\hbar k,\ E=\hbar\omega$ の関係を用いた．力学法則としての古典と量子の繋がりを波動の位相に注目して Ψ に飛躍したのが歴史であるが，量子力学が引き起こした深刻な古典との差はむしろ Ψ の重ね合わせの原理の解釈にある．例えば $\Psi=\alpha e^{iS_1(q,t)/\hbar}+\beta e^{iS_2(q,t)/\hbar}$ のような重なった状態の古典近似を行えば

$$\alpha\left(\frac{p_1^2}{2m}-E_1\right)+\beta\left(\frac{p_2^2}{2m}-E_2\right)=0 \tag{4.20}$$

のようになる．これは個別には古典運動のルールに従っていなくてもよいと解釈できる．

4.3.3 WKB 近似と作用積分量子化

前節では H-J 方程式がシュレディンガー方程式を示唆するという議論をみたが，逆にシュレディンガー方程式を近似的に解く処方としてこの議論を使うことができる．1 粒子のシュレディンガー方程式の解を

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=A(\boldsymbol{x},t)\exp[iS(\boldsymbol{x},t)/\hbar] \tag{4.21}$$

の形に仮定すると，$\rho=A^2$ と書いて，次の方程式が導かれる．

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=\left[\frac{(\nabla S)^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right], \tag{4.22}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\frac{\nabla S}{m}\right)=0. \tag{4.23}$$

上式の最後の項を無視する WKB(Wigner–Kramers–Brillouin) 近似の下では，波動関数はこの形に表されることが分かる．一次元の周期運動の定常状態を考えると，$p(x)^2=(dS/dx)^2=2m(E-V(x))$ から導かれる $p(x)=\sqrt{2m(E-V(x))}$，$V(x_1)=V(x_2)=E$ を用いて

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')dx'\right]\right.$$
$$\left. + B\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')dx'\right]\right] \tag{4.24}$$

のような形で書かれる．この関数の正則性と一義性から

$$\oint pdq = \left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar \tag{4.25}$$

という作用積分量子化条件が得られる．前期量子論の時代にはこの量子化条件が活躍した．またこれを多自由度に拡張したのがEBK(Einstein-Brillouin-Keller)量子化条件である．周期運動なら正準共役な変数は正準変換によって角変数に共役な変数 I に変換できる．この場合には $\oint pdq = \oint Id\phi = 2\pi I$．角運動量は I の例である．

WKB 近似は $V(x) > E$ の x 領域でも有効である．$x > x_2$ の領域では，$p(x) = i|p(x)|$ として，

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}}C\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} |p(x')|dx'\right] \tag{4.26}$$

のように与えられる．この近似はポテンシャル障壁を透過するトンネル効果の計算に有用である．

4.4 状態空間を元にした古典力学の見直し

古典力学から量子力学への飛躍は演繹的ではない．原子のスペクトルなどの実験事実に見られる関係を導出することでこの飛躍がなされた．その物理的解釈あるいは物理的直観については今日においてもしばしば論争になるが，その数理的手法に関しては1927年当時から変わっていない．

「論争」の一つの火種は古典力学との実在に対する記述法の差にある．古典力学では実在そのものが如何に記述されるべきかを含めてユニークな存在であるとする観念が強い．しかし，解析力学で展開される状態空間の様々な変換論や対称性と保存量といった議論は，一つの実在するシステムの記述法がユニークでなく，数理的に等価な記述法あるいは表現法が無数に可能であることを教えている．また同時に見かけの違いにも関わらず等価なものを同定する群論的手法や保存量の数学が必要になる．またある一つのシステムの状態空間の構成の仕方もユニークでない．

この状態空間の表現法の自由さ，ある意味での無限定さは，実在するシステムそれ自体が観測者に「如何に記述されるべきか」をユニークには指示しないことである．したがって，古典力学であっても解析力学に抽象化された視点に立てば決して「記述法を指示している」のではない．「あるべき記述法」あるいは「実在に固有な変数」といった発想を生むものは力学理論の内部に存在する

のではない．むしろ，物体というモノに対する我々の素朴なイメージにあるのである．これには歴史的経緯があり，粒子運動のニュートン力学の後にこれを多体，剛体，弾性体，流体というモノに拡張する際に解析力学が整備されてきたことを想起すべきである．そして，これらマクロの現象の背後に粒子の力学に従う原子集団を見るようになると二十世紀のモノは再びニュートンの時代に逆戻りして物理学の素養から解析力学が欠落してきたのである．

解析力学が築いた状態空間が “ユニークな” 或いは “本来の” 変数や記述法を指示していないとなると，観測主体の関心，意図，簡明さなどなどの記述法に対するオプションが登場することになる．過去も未来も，モノとしての同一性も，状態空間にはいったん解体して情報は格納されている．そして観測主体はそこから「同一のモノ」とか「過去と未来の繋がり」とか，意図を明確にして格納庫から観測値を引き出すのである．状態空間を第一義的な理論的概念として位置づける解析力学の古典力学はこの二段階構造で考えた方がいいのかもしれない．古典力学のこうした見直しを量子力学は要求しているように思える．

両者を繋ぐのは後述する与えられた状態での物理変数の期待値を与える量子力学の公式

$$\langle A(\alpha,\beta.\cdots)\rangle = \mathrm{Tr}[\hat{A}\rho(\alpha,\beta,\cdots)] \tag{4.27}$$

である．これ自体の説明は後述することになるが，物理量 A の状態密度 ρ の下での期待値 $\langle A\rangle$ を与える関係式である．$\alpha,\beta,\cdots$ などは状態指定のパラメータである．またトレース Tr は全状態空間にわたって和を取ることである（5.3.1 節参照）．これに相当する古典力学の関係式は例えば

$$\langle A(t)\rangle = \int A(q,p)S(q,p,t)dqdp \tag{4.28}$$

のようなものである．S は ρ に相当して観測主体が状態空間に発する問いかけである．古典力学では S はデルタ関数のように一点を拾い出すようになっているために，このような二段階構造は屋上屋を重ねた無用なものに思えるのである．

コラム5　孤独になったアインシュタイン

ドイツでヒットラーのナチスが政権についてユダヤ人排斥を進める様になった1934年，ベルリン大学教授だったアインシュタインは米国に亡命し，プリンストンの高等科学研究所に身を寄せ，そこで晩年を過ごした．第二次大戦での原爆創造の指導者として時の人となった理論物理学者のオッペンハイマーは戦後ながくこの研究所の所長を勤め，この研究所の声価を高めた．

1965年，アインシュタインの功績を称えるある会合で，オッペンハイマーは次のような講演をしている．「しかしアインシュタインの晩年の25年ほどの間，彼が従った伝統は彼を誤らせた．それは彼がプリンストンで過ごした時代のことであり，悲しいことだがそれは内緒にしておくべきことではない．彼には自分のやり方で考える権利があった」（A.P. フレンチ編「アインシュタイン」p.54，柿内賢信ほか訳，培風館，1981年）．

アインシュタインは，専門家としても科学者の鑑であり，また，広い世間でも好感度ナンバーワンの科学者である．このアインシュタインを抱えていた研究所の長が，それを自慢するのでなく，うちに居った期間はちょうど「誤っていた時期」でしたと言っているのである．「晩年の25年」なら51歳頃からだから，決して「年寄りのボケ」で片付くものではない．

しかし，アインシュタインが学界主流から外れていたのは事実である．1956年大学入学で物理学を勉強しはじめた筆者にもその実感がある．当時のカリスマはハイゼンベルグやランダウであり，アインシュタインの名は量子力学の「隠れた変数」理論を唱えた反主流派の巨頭の様なイメージがあった．現在の様にアインシュタインが物理学のアイコンに復活するのは，1970年代からである．

筆者には「孤独になったアインシュタイン」（岩波書店）という題名の著書があるが，「孤独になった」理由には

A　物理学上の二つのずれ：量子力学反対と「統一場理論」

B　ユダヤ人として歴史に翻弄された人生をめぐる不幸

がある．Aについてはさらに詳しく別コラムで記す．Bには，B1：生まれ育ったドイツ語圏の物理学の同僚から引き離された孤独さと，B2：家族的な孤独さもあった．B1には，学界主流の関心が原子核・素粒子の新興の物理に集中したこと，さらに戦時下での原爆やレーダーなどへの科学者動員に既に若くはなく，また亡命者であるアインシュタインは埒外におかれたこと，も背景にある．B2では，30代で離婚したミネルバと彼女と暮らしていた二人の息子達を襲った不幸がある．戦時下の欧州の惨禍でアメリカに亡命していた長男ハンスとの確執や次男の精神的病いは，別居しているとはいえ心休まらないことだっただろう．孫に囲まれた幸せな老人の姿からはほど遠いものだった．

コラム6　アインシュタインの復活

現代物理学のアイコンといえばアインシュタインである．1979年のアインシュタイン生誕百年には世界各地で記念学会が開かれ，世紀末の「20世紀の代表人物」選びには，サルトル，ピカソ，レーニン，ケインズ，フロイド，ビートルズ等と並んで，アインシュタインは必ず入ったし，さらに，1905年のアインシュタインの「驚異の年」から百年目の2005年には世界物理年が設定され，教育や産業の世界も巻き込んで多くのイヴェントが実施された．こんな人物が，一時期とはいえ，学界主流から外れていたとは想像し難いことである．

いったん地に堕ちたアインシュタインが再興したのは1970年代に入ってからである．これには次の二つの科学研究の動向が背景にある．

1. 1960年代の「宇宙の発見の時代」でビッグバンやブラックホールに注目が集まり，物理学としての一般相対論の地位が変わった．
2. 大型加速器の実験が進み，1970年代後半，素粒子相互作用理論がゲージ理論で完結したが．これは一般相対論導出原理の拡張であった．

アインシュタインの物理学上の「ずれ」は次の二つであった．

A　1927年版量子力学は完成理論でないと反対した．

B　一般相対論を拡張する幾何学的な「統一場理論」に没頭．

歴史的には，学界全体がボーア達の指導のもと，量子力学をツールに原子・分子，固体電子や原子核・素粒子の物理に快進撃している急流を横目で見て敢えてそれに棹さすのを止め，そこから身を引いてひっそりと籠ってでもやれる「統一場理論」の試みをした．しかし物理学が完全に量子力学を受け入れた時代になっても彼はAの立場を表明している．70歳記念論文集「アルバート・アインシュタイン　哲学者―科学者」(1949年）には彼自身も「自伝ノート」(中村誠太郎ほか訳，東京図書，1978年）を執筆したが，そこでも量子力学への反対を書いている．現行の理論を「統計的量子論」と呼び，いわば力学に対する統計力学の位置にあるものと位置づけて,「新たな力学」の存在を信じていた.「しかし，私はこの理論は将来の発展のいかなる有効な出発点をも与えてくれないと信ずる．この点が，私の期待が現代の物理学者のそれと最も大きく懸け離れている点である」ここまではっきりと自覚して反対を貫いている．

Bの試みは一般相対論成功の柳の下に泥鰌はまだ一杯いるという発想である．原子核素粒子物理の進捗を全く無視したこの試みは1965年当時でもまだ「誤り」とされる程に評価は低かった．しかし，当時，オッペンハイマーも読めなかった展開がその後にあったのだ．原子から素粒子へと進んだミクロの世界の探求が，いったんは彼を孤独にしたが，最終段階で完全に彼の勲章に転化した．ミクロの世界探索のツールである量子力学の批判者であるという「昔話」はみな忘れて，アインシュタインのカリスマ性は復活したのである．

第 5 章
量子力学の数理ツール

ベクトルとはそれらの和およびスカラー (K) を乗ずる演算をおこなったものがやはりベクトルであるような数学的存在である．このようなベクトルの集合を K 上のベクトル空間あるいは線形空間という．ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ とは K が複素数の場合のベクトル空間である。そしてベクトルの長さについてのシュワルツの不等式は不確定性関係を導き出す．

5.1 ヒルベルト空間のベクトル

5.1.1 二種類のベクトル：ブラとケット

ベクトル空間には二種類のベクトル，ブラ $\langle a|$ とケット $|b\rangle$，があり，それらから K を導く演算が内積である．いま α を複素数として，$\mathcal{H}$ での内積は

$$\langle a|b\rangle = \alpha, \quad \langle b|a\rangle = \alpha^*, \text{ あるいは, } \langle a|b\rangle = (\langle b|a\rangle)^* \tag{5.1}$$

で定義される．内積が実数となる $\langle a|$ と $|a\rangle$ はエルミット共役という互いにデュアルな関係にあり，独立なものではない．$\mathcal{H}$ ではさらに，ベクトルの “長さ” に

$$\langle a|a\rangle \geq 0 \tag{5.2}$$

が要請される．

次にベクトルの外積に当る $|a\rangle\langle b|$ を考えると，それはベクトルに

$$(|a\rangle\langle b|)|\psi\rangle = |a\rangle\langle b|\psi\rangle = \beta|a\rangle, \text{ ただし, } \beta = \langle b|\psi\rangle \tag{5.3}$$

のように作用する．この外積はベクトル $|\psi\rangle$ を別のベクトル $\beta|a\rangle$ に変換する作用を行うと解釈できる．すなわち，この外積はオペレータの一種であると見なされる．

また後に，異なるヒルベルト空間 $\mathcal{H}_A$ と $\mathcal{H}_B$ のベクトルから構成される合成系の記述には，$|a_A\rangle|a_B\rangle$ や $\langle a_A|\langle a_B|$ のようなベクトルのテンソル積を考える

ことになるが，これらは上述の内積や外積とは別の概念である．

5.1.2 基底ベクトルでの展開とユニタリー・オペレータ

$\mathcal{H}$ の一般のベクトル $|\psi\rangle$ を基底ベクトル $|a_i\rangle$ とその成分 α_i で

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i |a_i\rangle \tag{5.4}$$

のように展開できる．ここで基底ベクトルは互いに独立で，

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij} \tag{5.5}$$

の規格直交なベクトルの組である。$\langle a|a\rangle = A > 0$ だから，$|a\rangle/\sqrt{A} \to |a\rangle$ により規格化は常に可能である．$\mathcal{H}$ の次元とは独立な基底ベクトルの数 n である．$|\psi\rangle$ の "長さ" は内積により，

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} |\alpha_i|^2. \tag{5.6}$$

オペレータ $\hat{A}$ とはあるベクトル $|\alpha\rangle$ に作用してそれを一般には別のベクトル $\hat{A}|\alpha\rangle$ に変える．このベクトルと $\langle\beta|$ の内積 $\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle$ は一般には複素数である．$\hat{A}$ にエルミット共役なオペレータ $\hat{A}^\dagger$ であるとは

$$\langle\alpha|\hat{A}^\dagger|\beta\rangle = (\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle)^*. \tag{5.7}$$

次にベクトルの "長さ" を変えないユニタリー・オペレータ $\hat{U}$ を導入する．$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ として

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \tag{5.8}$$

が成り立つためには，$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$，すなわち$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ が要請される．

5.2 オペレータの表現

5.2.1 オペレータの固有値と固有ベクトル

オペレータ $\hat{A}$ は

$$\hat{A}|\psi_a\rangle = |\psi_b\rangle \tag{5.9}$$

のように，$|\psi_a\rangle$ を $|\psi_b\rangle$ に変える作用をする．これら二つのベクトルを

$$|\psi_a\rangle = \sum_i \alpha_i |a_i\rangle, \quad |\psi_b\rangle = \sum_k \beta_k |a_k\rangle \tag{5.10}$$

と同じ基底ベクトルで展開して，これを上式に代入すれば $\sum \alpha_i \hat{A}|a_i\rangle = \sum \beta_k |a_k\rangle$．これと $\langle a_{k'}|$ との内積を取れば

$$\sum_i A_{k'i}\alpha_i = \beta_{k'}. \tag{5.11}$$

ここで，$A_{k'i} = \langle a_{k'}|\hat{A}|a_i\rangle$．$k'$ を変えれば，これらは n 本の線形連立方程式を表す．この方程式のセットは行列の表現法で次のように書かれる．

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdot \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \cdot \\ \beta_n \end{pmatrix}. \tag{5.12}$$

物理学のいろいろな問題で共通した数理的手法だが，$\bar{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ となるような行列 $\bar{A}$ の固有値 λ と各固有値に対応する固有ベクトル $|\lambda\rangle$ を求めると見通しよく議論できる．

ここで $\bar{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ から $(\bar{A} - \lambda\bar{1})|\lambda\rangle = 0$ であるが，$|\lambda\rangle$ がゼロベクトルでないための条件として $\det|\bar{A} - \lambda\bar{1}| = 0$ という条件が与えられる．これは λ についての n 次の代数方程式であり，その根として固有値 λ_i が一般には n 個求まり，各々の固有値に対応した固有ベクトルが定まる．例えば固有値 λ_2 の固有ベクトルの場合は，単位列ベクトルを用いて次のように書ける．

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{5.13}$$

固有ベクトルについて線形だから，その長さは何時でも 1 に規格化できる．そして一般のベクトルは固有ベクトルの基底を用いて次のように展開できる．

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdot \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix} \cdots + \alpha_n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{5.14}$$

オペレータ $\hat{A}$ や $|\psi\rangle$ の行列による表現は基底ベクトルの選択に依存する．すなわち，ある U で変換することによって $(U\hat{A}U^\dagger)$ が対角行列変換されるとすれば，$\hat{A}|\psi_a\rangle = |\psi_b\rangle$ は $(U\hat{A}U^\dagger)(U|\psi_a\rangle) = U|\psi_b\rangle = \lambda(U|\psi_a\rangle)$ のようになるから，$(U|\psi_a\rangle)$ が単位列ベクトルに変換されることを意味する．

5.2.2 オペレータの基底ベクトルによる表現

行列などの表現が基底ベクトルの選択に依存することを明示的に表現するには，後述の (5.21) 式を用いれば，$A_{ij} = \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle$ として，

$$\hat{A} = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\hat{A}\sum_j |a_j\rangle\langle a_j| = \sum_i\sum_j A_{ij}|a_i\rangle\langle a_j| \tag{5.15}$$

のように，$\hat{A}$ を基底ベクトルの外積を用いて書くことができる．このようにとれば，$\langle a_m|\hat{A}|a_n\rangle = A_{mn}$ は自明であり，また $\hat{A}^\dagger = \sum\sum A_{ij}^*|a_j\rangle\langle a_i|$.

$\hat{A}$ をその固有ベクトルを基底にとって表せば

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|. \tag{5.16}$$

一方，$\hat{A}^\dagger = \sum\lambda_i^*|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ だから，λ_i が実数であるのは $\hat{A}$ が自己共役 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ の場合となる．

$\hat{A}$ を固有ベクトルに作用させると

$$\hat{A}|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle, \text{ すなわち, } \frac{\langle\lambda_i|\hat{A}|\lambda_i\rangle}{\langle\lambda_i|\lambda_i\rangle} = \lambda_i \tag{5.17}$$

であり，λ_i を $\hat{A}$ の固有ベクトルでの値という．今度は，一般のベクトル $|\psi\rangle = \sum_i\alpha_i|\lambda_i\rangle$ での $\hat{A}$ の値を計算すると

$$\frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_i\left[\frac{|\alpha_i|^2}{\sum_i|\alpha_i|^2}\right]\lambda_i = \sum_i \mathrm{Pr}(\lambda_i)\lambda_i. \tag{5.18}$$

ここで

$$\mathrm{Pr}(\lambda_i) = \frac{|\alpha_i|^2}{\sum_i|\alpha_i|^2}, \quad \sum_i \mathrm{Pr}(\lambda_i) = 1 \tag{5.19}$$

である．(5.18) 式は λ_i に比率 $\mathrm{Pr}(\lambda_i)$ をかけて平均した値になっている．$\langle\psi|\psi\rangle > 0$ だから，以下では "長さ" が 1 の $|\psi\rangle$ を考えることにすれば，$\sum_i|\alpha_i|^2 = 1$ であり，$\mathrm{Pr}(\lambda_i)$ を確率，平均の値を期待値と呼ぶことにする．

すると，その値が確率を与えるオペレータ $\hat{\Pi}$ を次のように導入できる．

$$\hat{\Pi}_i = |a_i\rangle\langle a_i|, \quad \text{として,} \quad \mathrm{Pr}(i) = \langle\psi|\hat{\Pi}_i|\psi\rangle = |\alpha_i|^2. \tag{5.20}$$

また $\hat{\Pi}_i|\psi\rangle = \alpha_i|a_i\rangle$ のように，一般の方向のベクトルを $|a_i\rangle$ 方向のベクトルに射影するものだから，射影オペレータとも呼ばれる．ここで $\sum_i|\alpha_i|^2 = 1$ だから，

$$\sum_i \hat{\Pi}_i = \hat{1} \tag{5.21}$$

でなければならない．基底ベクトルセットの選択に応じて様々な射影オペレータが定義され，それら全体の和は単位オペレータ $\hat{1}$ でなければならない．このような $\hat{1}$ の基底ベクトルによる展開をスペクトル展開という．

5.3 状態の純粋状態と統計集団

5.3.1 トレースと密度行列

数学的道具の数をもう少し増やしておこう．先に，オペレータのエルミット

共役という操作を見たが，もう一つ，トレースという操作を見ておく．トレースとは，例えば外積で表現されたオペレータについては，外積を内積に置き換える次のような操作である．

$$\mathrm{Tr}|\alpha\rangle\langle\beta| = \langle\beta|\alpha\rangle. \tag{5.22}$$

この定義を使うと，一般の $\hat{A}$ に対しては，

$$\mathrm{Tr}\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij}\mathrm{Tr}|a_i\rangle\langle a_j| = \sum_{i,j} A_{ij}\langle a_j|a_i\rangle = \sum_{i,j} A_{ij}\delta_{ji} = \sum_i A_{ii}. \tag{5.23}$$

基底ベクトルを変えると行列成分の値も変わるが，トレースは基底にかかわらず同じ値であることが次のように分かる．

$$\begin{aligned}\sum_i \langle a_i|\hat{A}|a_i\rangle &= \sum_i \langle a_i|\hat{A}\left(\sum_m |b_m\rangle\langle b_m|\right)|a_i\rangle \\ &= \sum_{i,m}\langle b_m|a_i\rangle\langle a_i|\hat{A}|b_m\rangle \\ &= \sum_m \langle b_m|\left(\sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\right)\hat{A}|b_m\rangle = \sum_m \langle b_m|\hat{A}|b_m\rangle. \end{aligned} \tag{5.24}$$

トレースを使うと $|\psi_\alpha\rangle$ での期待値 $\langle A\rangle_\alpha$ は

$$\langle A\rangle_\alpha = \mathrm{Tr}[(|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|)\hat{A}] \tag{5.25}$$

と書ける，したがって，確率 p_α で混じり合った状態での期待値は次のように書ける，

$$\langle A\rangle = \sum_\alpha p_\alpha\langle A\rangle_\alpha = \sum_\alpha p_\alpha \mathrm{Tr}[|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|\hat{A}] = \mathrm{Tr}\rho\hat{A}. \tag{5.26}$$

ここで $\rho = \sum_\alpha p_\alpha|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|$ は密度行列と呼ばれる．また $\mathrm{Tr}\rho = 1$ である．状態が一つの場合は $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ は純粋状態，複数の場合は混合状態と呼ばれる．

本書では“状態ベクトルとオペレータ”を基本にしているが，“トレースと（密度行列を含む）オペレータ”の形式で量子力学を表現することもできる．確率計算が理論の目的であるとした状態ベクトルは途中の数学的補助手段だという立場を貫こうとする試みである．

5.3.2 状態の重ね合わせと統計集団

$\mathcal{H}$ 空間のベクトルとオペレータという数学的存在を物理的存在の記述にどう対応させるかが次の課題である．ところがこの「対応」は量子力学成立後85年以上過ぎた今日でも論争の絶えない課題なのである．しかしこの間にも量子力学は多くの場面で大活躍し，この数学的道具立ての使用法についても大きな進展があった．したがってこの「対応」は「入門」のところに記述するというよりは，多くの使われ方の実態を知った上で考察する必要があるのである．「入門」

の部分が一番深刻な課題なのである．そこでここでは，ある一つの「対応」付けを軽く概観することで，数学的存在の物理学でのイメージを少し付けておくことにする．

系の状態を表しているのがベクトル $|\psi\rangle$ であり状態ベクトルと呼ぶことにする．状態を指定するのが観測（測定）量であり，それはオペレータ $\hat{A}$ に対応する．状態がオペレータの固有状態 ($|\psi\rangle = |\lambda_i\rangle$) なら観測の毎に確定値 ($\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \lambda_i$) が得られる．しかし，一般の状態は異なる固有状態の重ね合わせの状態 ($|\psi\rangle = \sum \alpha_i|\lambda_i\rangle$) である．このため観測値は確定しないが，同一状態 $|\psi\rangle$ に準備された系の多数回の観測値データの統計的記述は "重ね合わせ" の情報で確定的に与えられている．すなわち，観測量の期待値は確率 $\mathrm{Pr}(\lambda_i)$ による平均値として

$$\langle A\rangle = \sum_i \lambda_i \mathrm{Pr}(\lambda_i),\ \text{ただし}\quad \mathrm{Pr}(\lambda_i) = |\alpha_i|^2 \tag{5.27}$$

で与えられる．

ここから「ある一つの「対応」」の微妙な点に差しかかるが，観測値とは測定装置が示す値であって観測対象としている系そのものの量ではない．一応，系から独立した観測者がある λ_i なら確定的に起こる事象（イヴェント）を設定しておいてその回数をカウントするのが観測である．「値を測る」というよりは「その値なら確定的に起こる事象の回数を数える」ことである．何を「その値」にするかは観測者の選択であり，それが実験の上手下手ということである．

このように観測とは観測者側が用意した選択肢への回答の度数分布のことであると割り切るならば，系そのものの性質とは確率のことであるとなる．このように系の観測は確率の観測であるという視点に立つと，それを表すオペレータが必要になり，これが射影演算子 $\hat{\Pi}_i$ の組であるといえる．ところで，この「$\hat{\Pi}_i$ の組」は一義的でなく，その選択（$\hat{1}$ のスペクトル分解）が実験の上手下手に対応する．「上手」とはできるだけ確定的な情報を得ることであるが，情報とは用意された可能な組の中から幅を狭めていくことである．このために新たな観測可能な選択肢の発見も必要であろう．

このような情報獲得の態度はあまりにも受動的に見える．系自体を制御して用意した観測装置により確定的な回答をするように状態を導いていくという能動的な系への働きかけがあってもいい．もし制御による状態の変化が一義的であるならば，制御後の状態に関するより確定的な観測結果から制御前の状態に関するより良い情報が得られるであろう．すなわち，$\hat{\Pi}_i$ の組の選択と連携して，状態ベクトルの外部からの制御ができれば，観測の向上に繋がる．これが $|\psi\rangle$ を新しい状態ベクトル $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ に導くユニタリー変換 $\hat{U}$ による状態制御の課題であり，近年の技術の進歩によって量子コンピュータなどへの進展が期待されているものである．

この段階では数学的道具立てと系の記述の「対応」の話はこの程度にしてお

く．これだけの記述に対しても異論百出であろう.「観測しなくても系は存在するのだから，観測者主導の理論構成はおかしい」,「系と観測装置の合成系も系と同じ法則に従うのだから区別するのがおかしい」,「$|\psi\rangle$ の変化が $\hat{\Pi}_i$ と U の二本立てはおかしい」,「状態ベクトルの成分の全情報（干渉効果など）が使われていないから，確率記述は不十分である」，などなど，80 年以上にわたって提起されてきた疑問が噴出するであろう．

5.4 変換と変化

5.4.1 能動変換と受動変換

いま基底ベクトルの組 $|a_i\rangle$ を別の組 $|b_i\rangle$ に取り替えることを考える．座標軸を変えれば座標値が変わるように，基底を変えれば同じベクトルでもその成分が変わる．例えば同一のベクトルの成分が単に基底の取り替えで別の成分に変わる変換は，単なる表現法の差に起因するものだから，これは受動変換（パッシブ変換）と呼べる．それに対して，基底をそのままにして成分を変える変換は能動変換（アクティブ変換）と呼ぶ．例えば基底を変えたのに成分を前と同じにしておけば能動変換である．しかし，能動変換に追随して受動変換を行うことで成分が不変に止まるようにすることもできる．

いまこうした同一ベクトルを異なった基底で表現した場合の成分の受動変換をみてみる．基底ベクトルの変換は，長さを変えない変換だから，ユニタリー変換 $\hat{U}=\sum_{i,j}u_{ij}|a_i\rangle\langle a_j|$ で与えられる．そして条件 $\hat{U}^\dagger\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^\dagger=\hat{1}$ より

$$\hat{U}^\dagger U=\sum_{i,j,m,n}u^*_{mn}u_{ij}|n\rangle\langle m|i\rangle\langle j|=\sum_{j,m,n}u^*_{mn}u_{mj}|n\rangle\langle j| \tag{5.28}$$

だから成分 u_{ij} は

$$\sum_m u^*_{mn}u_{mj}=\sum_m u^*_{mj}u_{mn}=\delta_{nj} \tag{5.29}$$

を満たす．

$\hat{1}$ を新しい基底 $|b_i\rangle$ でスペクトル分解した関係を $|\psi\rangle$ の成分展開の式に挿入して

$$|\psi\rangle=\sum_i\alpha_i\hat{1}|a_i\rangle=\sum_i\alpha_i\left(\sum_m|b_m\rangle\langle b_m|\right)|a_i\rangle. \tag{5.30}$$

したがって $|\psi\rangle=\sum_i\alpha_i|a_i\rangle=\sum_m\beta_m|b_m\rangle$ となるには成分は

$$\beta_m=\sum_i\alpha_i\langle b_m|a_i\rangle \tag{5.31}$$

の受動変換を受けることになる．一方，$|a_i\rangle$ から $|b_m\rangle$ へのユニタリー変換の観点からは次のようになる．

$$\hat{U}|a_k\rangle = \sum_{i,j} u_{ij}|a_i\rangle\langle a_j|a_k\rangle = \sum_i u_{ik}|a_i\rangle = |b_k\rangle. \tag{5.32}$$

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_i \alpha_i|a_i\rangle = \sum_{n,j} \alpha_n\delta_{nj}|a_j\rangle \\ &= \sum_{m,n,j} \alpha_n u_{mn}u^*_{mj}|a_j\rangle = \sum_m \beta_m|b_m\rangle\end{aligned} \tag{5.33}$$

となるから，基底と成分が

$$|b_m\rangle = \sum_j |a_j\rangle u_{jm},\ \beta_m = \sum_n \alpha_n u_{mn} \tag{5.34}$$

のように連携して変換されれば，同一ベクトルを表すのである．前に求めた変換係数は $\langle b_m|a_i\rangle = u_{mi}$ である．

例として，いま $U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ で基底を変換すれば，変換は $|b_1\rangle = |a_2\rangle$, $|b_2\rangle = |a_1\rangle$．状態として $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 0$ を取れば，成分の変換は $\beta_1 = 0$, $\beta_2 = 1$．したがって

$$|\psi\rangle = 1 \times |a_1\rangle + 0 \times |a_2\rangle = 0 \times |b_1\rangle + 1 \times |b_2\rangle$$

となって，この連携した変換ではベクトルは変換を受けない．

一般に $\langle\psi|U^\dagger U\hat{A}U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ であるから，U による状態の変換は $|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$，オペレータの変換は $\hat{A} \to U\hat{A}U^\dagger$ であると呼ぶことにする．能動的にオペレータだけ変換し，状態をそのままということは $\langle\psi|(U\hat{A}U^\dagger)|\psi\rangle = (\langle\psi|U)\hat{A}(U^\dagger|\psi\rangle)$ であるから，これはオペレータをそのままにして，状態を $U^\dagger$ で変換したのと同等であることを教えている．

5.5 不確定関係

ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ では同じベクトルの内積は正値であるとしている．このことに由来して，二つのベクトル $(|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle)$ の三つの内積 $(\langle\phi_1|\phi_1\rangle, \langle\phi_2|\phi_2\rangle, \langle\phi_1|\phi_2\rangle)$ の間に次のシュワルツの不等式が成り立つ．

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle\langle\phi_2|\phi_2\rangle \geq |\langle\phi_1|\phi_2\rangle|^2. \tag{5.35}$$

これは $|\psi\rangle = |\phi_2\rangle - \frac{\langle\phi_1|\phi_2\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}|\phi_1\rangle$ というベクトルも $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ を満たすというヒルベルト空間ベクトルの条件である．幾何的イメージでいうと，$|\psi\rangle$ は，$|\phi_2\rangle$ から $|\phi_1\rangle$ との重なり分 $(\langle\phi_1|\phi_2\rangle)$ を取り除いた，$|\phi_1\rangle$ に直交するベクトルである．この不等式での等号は二つのベクトルが平行のとき，すなわち $|\phi_2\rangle = \lambda|\phi_1\rangle$ の場合である．

自己共役 $(\hat{A}^\dagger = \hat{A})$ なオペレータ $\hat{A}$, $\hat{B}$ の状態 $|\psi\rangle$ での期待値を $\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \langle B\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$ として $|\phi_1\rangle = (\hat{A} - \langle A\rangle)|\psi\rangle$ なるベクトルの内積は

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \langle\psi|(\hat{A}-\langle A\rangle)^2|\psi\rangle = \Delta A^2. \tag{5.36}$$

同様に $|\phi_2\rangle = (\hat{B}-\langle B\rangle)|\psi\rangle, \langle\phi_2|\phi_2\rangle = \Delta B^2$ である．ここで $\Delta A^2, \Delta B^2$ は分散の二乗である．

次に $\hat{A}' = \hat{A}-\langle A\rangle$, $\hat{B}' = \hat{B}-\langle B\rangle$ として，$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \langle\psi|\hat{A}'\hat{B}'|\psi\rangle$. ここで

$$\begin{aligned}\hat{A}'\hat{B}' &= \frac{1}{2}\left(\hat{A}'\hat{B}' - \hat{B}'\hat{A}'\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{A}'\hat{B}' + \hat{B}'\hat{A}'\right) \\ &= \frac{1}{2}[\hat{A}', \hat{B}'] + \frac{1}{2}\{\hat{A}', \hat{B}'\}\end{aligned} \tag{5.37}$$

と分けると，$[\hat{A}', \hat{B}']^\dagger = -[\hat{B}', \hat{A}']$ だからその期待値は虚数であり，$\{\hat{A}', \hat{B}'\}^\dagger = \{\hat{B}', \hat{A}'\}$ だから期待値は実数である．したがって

$$|\langle\psi|\hat{A}'\hat{B}'|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{4}\langle\psi|\{\hat{A}', \hat{B}'\}|\psi\rangle^2 + \frac{1}{4}|\langle\psi|[\hat{A}', \hat{B}']|\psi\rangle|^2$$

だから

$$|\langle\psi|\hat{A}'\hat{B}'|\psi\rangle|^2 \geq \frac{1}{4}|\langle\psi|[\hat{A}', \hat{B}']|\psi\rangle|^2 \tag{5.38}$$

すなわち，

$$|\langle\phi_1|\phi_2\rangle|^2 \geq \frac{1}{4}|\langle\psi|[\hat{A}', \hat{B}']|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}|\psi\rangle|^2$$

これをシュワルツの不等式に代入すると

$$\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle\psi[\hat{A}, \hat{B}]\psi\rangle| \tag{5.39}$$

なる不等式が導かれる．これはロバートソンの不確定性関係などと呼ばれる．ここで不等式の等号が成り立つ条件は次のように二段階である：

1）一つ目はシュワルツの不等式の等号が成り立つ条件

$$|\phi_2\rangle = \lambda|\phi_1\rangle. \tag{5.40}$$

2）二つ目は

$$\langle\psi|\{\hat{A}', \hat{B}'\}|\psi\rangle = 0 \tag{5.41}$$

であり，これより結局

$$(\lambda+\lambda^*)(\Delta q)^2 = 0 \tag{5.42}$$

という条件が導かれる．したがって，γ を正の実数として $\lambda = i\gamma$ で表すことができ，この最小不確定状態では

$$\gamma = \frac{\Delta B}{\Delta A}. \tag{5.43}$$

したがって，条件 $|\phi_2\rangle = \lambda|\phi_1\rangle$ は $(\hat{B}' - i(\Delta B/\Delta A)\hat{A}')|\psi\rangle = 0$，すなわち

$$\left(\frac{\hat{A}'}{\Delta A}+i\frac{\hat{B}'}{\Delta B}\right)|\psi\rangle=0. \tag{5.44}$$

さらに，$\hat{A},\hat{B}$ が正準共役なら $[\hat{A},\hat{B}]=i\hbar$ であり $\Delta A\Delta B=\hbar/2$ という条件が重なるから，

$$\gamma=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{(\Delta A)^2}=\frac{2}{\hbar}(\Delta B)^2 \tag{5.45}$$

と求まる．

$\hat{A},\hat{B}$ が正準共役な変数の組であれば $[\hat{A},\hat{B}]=i\hbar$ であり，(5.39) 式は

$$\Delta A\Delta B\geq\frac{1}{2}\hbar \tag{5.46}$$

となる．このような不等式は 1927 年にハイゼンベルグの不確定性関係として提起されたものである．そして量子力学の不可知論的なイメージを作ってきたものである．しかし彼の導出はここで述べた議論とは若干違っていてその後に導かれたものである．当初のハイゼンベルグの観測行為に伴う制御不能な不確定性という解釈との関係を見るには第 12 章で見るような測定過程に踏み込まねばならない．ハイゼンベルグのオリジナルな意図の議論は 12.4 節で再論する．

第 6 章
周期的離散系

変換理論のイメージはオペレータが状態を生成することではなく，すでに用意された状態の間の移動をオペレータが指示するというものである．すなわち，オペレータの役割は，閉じた有限な状態のセットを用意して，その中での組み替え操作であると考えるのがよい．

連続量の場合でも，まず有限区間に分割した場合を考えた上で，その区間数を増やす極限と考える方がベクトルのイメージが描き易い．

6.1　周期境界条件

6.1.1　シフト変換の固有状態

$k = 0, 1, 2, \cdots$ と離散的に区分された状態のセットに周期的境界条件を付加する．すなわち，k に最大値 n があって，$k = 0, 1, 2, \cdots, n-1$ となった次の $k = n$ が $k = 0$ と同じであるとする．これを数学では「n を法として (modulus)」と言い，　mod $(jn + k) = k$ などと書く．ゼロが 12 でもある時計盤もこの方式の表示法であり，時計算とも呼ばれる．

次に $U|u_k\rangle = |u_{k+1}\rangle$ なるシフト変換を考える．U を繰り返し m 回作用させると，$U^m|u_k\rangle = |u_{k+m}\rangle$ である．したがって，周期条件は $U^n|u_k\rangle = |u_{k+n}\rangle = |u_k\rangle$ だから，U に対する条件は $U^n = 1$ となる．

いま $U|v\rangle = v|v\rangle$ となる U の固有状態 $|v\rangle$ を導入すると，周期条件から $v^n = 1$ である．したがって，ℓ を整数として，この解は $v_\ell = e^{\pm\frac{2\pi i\ell}{n}}$ と書ける．$\pm$ の選択をいま $-$ にとって，これらを固有値とするシフト変換 U の固有状態 $|v_\ell\rangle$ を導入すると

$$U|v_\ell\rangle = e^{-\frac{2\pi i\ell}{n}}|v_\ell\rangle. \tag{6.1}$$

次に $|v_\ell\rangle$ のセットと $|u_k\rangle$ のセットの関係を $|v_\ell\rangle = \sum A_k|u_k\rangle$ と置いて求める．まず

$$U|v_\ell\rangle = \sum_{k=0}^{n-1} A_k|u_{k+1}\rangle = e^{-\frac{2\pi i\ell}{n}} \sum_{n=0}^{n-1} A_k|u_k\rangle \tag{6.2}$$

だから $A_{k-1} = e^{-\frac{2\pi i\ell}{n}} A_k$ である．$A_n = A_0 = A$ と置けば $A_k = Ae^{\frac{2\pi i\ell k}{n}}$ となり

$$|v_\ell\rangle = A\sum_{n=0}^{n-1} e^{\frac{2\pi i\ell k}{n}}|u_k\rangle \tag{6.3}$$

と求まる．さらに，

$$\begin{aligned}\langle v_{\ell'}|v_\ell\rangle &= A^2 \sum_{k'=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1} e^{\frac{2\pi i\ell k}{n}} e^{\frac{-2\pi i\ell' k'}{n}} \langle u_{k'}|u_k\rangle \\ &= A^2 \sum_{k=0}^{n-1} e^{\frac{2\pi i(\ell-\ell')k}{n}} \end{aligned} \tag{6.4}$$

である．$\Delta\ell = \ell - \ell' \neq 0$ なら

$$\sum_{k=0}^{n-1} e^{\frac{2\pi i\Delta\ell k}{n}} = \frac{e^{\frac{2\pi i\Delta\ell n}{n}} - 1}{e^{\frac{2\pi i\Delta\ell}{n}} - 1} = 0 \tag{6.5}$$

だから $\langle v_{\ell'}|v_\ell\rangle = 0$．また $\ell = \ell'$ なら

$$\langle v_\ell|v_\ell\rangle = A^2 \sum_{k=0}^{n-1} 1 = A^2 n = 1 \quad \text{だから，} \quad A = \frac{1}{\sqrt{n}} \tag{6.6}$$

となる．

こうして最終的に次の基底ベクトルの変換則が得られる．

$$|v_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=0}^{n-1} e^{\frac{2\pi i\ell k}{n}}|u_k\rangle. \tag{6.7}$$

次に $V|v_\ell\rangle = |v_{\ell+1}\rangle$ のような変換をする $|v_\ell\rangle$ の状態セットに対するシフト変換の演算子 V を導入すれば，U の場合と同様な議論を経て，次のように対称的な関係にまとめることができる．

$$|v_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=0}^{n-1} e^{\frac{2\pi i\ell k}{n}}|u_k\rangle, \quad U|v_\ell\rangle = e^{-\frac{2\pi i\ell}{n}}|v_\ell\rangle. \tag{6.8}$$

$$|u_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\ell=0}^{n-1} e^{-\frac{2\pi ik\ell}{n}}|v_\ell\rangle, \quad V|u_k\rangle = e^{\frac{2\pi ik}{n}}|u_k\rangle. \tag{6.9}$$

固有値の指数の $\pm$ からの符号の選択は，次節で見る $|u_k\rangle \to |q\rangle$，$|v_\ell\rangle \to |p\rangle$ と対応させる連続極限で，交換関係が $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ になるように選んである．

6.1.2 連続の極限

まず $n \to \infty$, $\Delta q = \epsilon = L/n \to 0$ の極限として連続変数 q を考えてみる．L は有限なので p_ℓ は離散化されており，その間隔は $\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L}[(\ell+1)-\ell] = \frac{2\pi\hbar}{L} = \frac{2\pi\hbar}{\epsilon n}$ である．次に

$$|u_k\rangle \to |q_k\rangle\sqrt{\Delta q},\ |v_\ell\rangle \to |p_\ell\rangle\sqrt{\Delta p} \tag{6.10}$$

の対応を取ると，

$$\langle v_\ell|u_k\rangle = \langle p_\ell|q_k\rangle\sqrt{\Delta q\Delta p} = \langle p_\ell|q_k\rangle\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{n}}. \tag{6.11}$$

一方，$\langle v_\ell|u_k\rangle = e^{-\frac{2\pi i\ell k}{n}}/\sqrt{n}$ だから

$$\langle p_\ell|q_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{2\pi i\ell k}{n}}. \tag{6.12}$$

指数の肩に着目すると $\frac{2\pi\ell k}{n} = \frac{1}{\hbar}(\frac{h\ell}{\epsilon n})(\epsilon k) = \frac{1}{\hbar}p_\ell q_k$ であるが，$\epsilon \to 0$ の極限を取り $q_k \to q$ と書いて

$$\langle p_\ell|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ip_\ell q/\hbar},\quad \text{あるいは，}\quad \langle v_\ell|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{-ip_\ell q/\hbar} \tag{6.13}$$

が導かれる．

ここでさらに $L \to \infty$ の極限を取れば p も連続変数になる．この場合基底ベクトルによる $\hat{1}$ のスペクトル展開は次のようになる．

$$\hat{1} = \sum_k |u_k\rangle\langle u_k| \to \hat{1} = \int |q\rangle dq\langle q|, \tag{6.14}$$

$$\hat{1} = \sum_\ell |v_\ell\rangle\langle v_\ell| \to \hat{1} = \int |p\rangle dp\langle p|. \tag{6.15}$$

一般のベクトル $|\Psi\rangle$ の q 表示の成分 $\langle q|\Psi\rangle = \psi(q)$ と p 表示の成分 $\langle p|\Psi\rangle = \psi(p)$ の関係は，例えば p でのスペクトル展開を用いて，次のように書ける．

$$\psi(q) = \int \langle q|p\rangle\langle p|\Psi\rangle dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \psi(p)e^{i\frac{pq}{\hbar}}dp. \tag{6.16}$$

また p によるスペクトル展開を用いると

$$\begin{aligned}\langle q|\hat{p}|\Psi\rangle &= \int \langle q|\hat{p}|p\rangle\langle p|\Psi\rangle dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int pe^{i\frac{pq}{\hbar}}\psi(p)dp \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}e^{i\frac{pq}{\hbar}}\psi(p)dp = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{i\frac{pq}{\hbar}}\psi(p)dp\right) \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\psi(q).\end{aligned} \tag{6.17}$$

すなわち q 表示では $\hat{p} \to (i/\hbar)\partial/\partial q$ に置き換えられる．また行列的にみれば $\langle q|\hat{p}|\Psi\rangle = \int\langle q|\hat{p}|q'\rangle\psi(q')dq'$ を意味する．いま，$|\Psi\rangle$ が $p = p_0$ の固有状態なら

$$p_0\psi_{p_0}(q) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\psi_{p_0}(q)\quad \text{だから，}\quad \psi_{p_0}(q) = A\exp\left[i\frac{p_0 q}{\hbar}\right] \tag{6.18}$$

の形になる．

6.1.3 離散フーリエ変換

ここで離散的な周期系に戻って，基底 $|u_k\rangle$ と基底 $|v_\ell\rangle$ の間の変換は離散フーリエ変換の一種であることを注意しておく．x も k も連続変数で，変域が無限大であればフーリエ変換は次のように与えられる．

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x)dx,\ f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} F(k)dk. \quad (6.19)$$

第二式の $F(k)$ に第一式を用いると，これは $\delta(x'-x) = (1/2\pi)\int e^{-ik(x'-x)}dk$ を意味する．

いま，x も k も連続でなく，m を整数として，$x = m\Delta x$ のように離散的であり，さらに m には最大値 n があるとする．すなわち，x は最小と最大を持つ整数で番号付けられた変数 x_m で置き代わる．フーリエ変換の発想は一般の関数の形状 $f(x)$ を波数 k の波動の重ね合わせで表現するというものであり，$F(k)$ はその重ね合わせの重みを与えるものであった．x が有限域の離散的な変数に変わったことで，直観的には波長を最大 $n\Delta x$ から最小 Δx まで整数で分割したものに局限される．すなわち，取り得る k は，ℓ を整数として，$k_\ell = 2\pi\ell/(n\Delta x)$ となる．そこで，$\Delta k = 2\pi/(n\Delta x)$ と置き，$f(m\Delta x) = f_m, F(\ell\Delta k) = F_\ell$ と書いて，フーリエ変換の積分を和に変えれば次のような関係になる．

$$F_\ell = \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}}\sum_m e^{-i\frac{2\pi m\ell}{n}} f_m. \quad (6.20)$$

ここで指数が $kx \to 2\pi\ell/(n\Delta x)\times(m\Delta x) = 2\pi m\ell/n$ となることを用いた．この f_m と F_ℓ の間の変換が離散フーリエ変換である．

離散的な u_a, v_b を連続変数 q, p に置き換えたのと逆に

$$F_\ell\sqrt{\Delta k} \to F_\ell,\quad f_m\sqrt{\Delta x} \to f_m \quad (6.21)$$

のように離散変数として定義し直すと，m, ℓ を正の整数とした，離散フーリエ変換は次のようになる．

$$F_\ell = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{m=0}^{n-1} e^{-i\frac{2\pi m\ell}{n}} f_m = \sum_{m=0}^{n-1} W_{\ell m} f_m. \quad (6.22)$$

ここで W_{ab} は次のように定義された変換係数である．

$$W_{ab} = \frac{1}{\sqrt{n}}\omega_n^{ab},\ ただし\ \ \omega_n = e^{-i\frac{2\pi}{n}}. \quad (6.23)$$

この変換係数は，

$$\sum_a W_{ab}W^*_{ab'} = \delta_{bb'} \quad (6.24)$$

なる規格直交条件を満たす．(6.23) 式より $W_{ab} = W_{ba}$ だから，この条件は $(WW^\dagger)_{bb'} = \delta_{bb'}$ であり，W_{ab} を成分とする行列はユニタリー行列である．

ここで複素数の組である $(F_0, F_1, \cdots, F_{n-1})$ や $(f_0, f_1, \cdots, f_{n-1})$ をヒル

ベルト空間のベクトルの成分と考える．そして $F_a = \sum_{b=0}^{n-1} W_{ab} f_b$ と $F'_a = \sum_{b'=0}^{n-1} W_{ab'} f'_{b'}$ の二つのベクトルのスカラー積を取ると

$$\sum_a F_a F'^*_a = \sum_b \sum_{b'} (\sum_a W_{ab} W^*_{ab'}) f_b f'^*_{b'} = \sum_b f_b f'^*_b \tag{6.25}$$

となることが分かる．基底の取り方によらずスカラー積が不変なことは，ベクトル $\boldsymbol{F}$ と $\boldsymbol{f}$ の成分の変換が基底ベクトルの取り替えによるものであることを示している．先に導入した基底ベクトル $|v_\ell\rangle$ と $|u_m\rangle$ を用いて同一ベクトルである条件は $\sum F_\ell |v_\ell\rangle = \sum f_m |u_m\rangle$ であるから，$F_\ell = \sum f_m \langle v_\ell | u_m \rangle$ となり，$\langle v_\ell | u_m \rangle = W_{\ell m}$ であることで確かめられる．

前にも見たように，W による変換を基底と成分の両方に共変的に行えば，同一ベクトルの表現の違いと言うパッシブな変換だが，何れか一方にこの変換を施せば別のベクトルに移すアクティブな変換である．

6.2 有限離散系

6.2.1 n が有限の場合

$n = 2, 3, 4$ の場合について，次のような量の表現を見ておく．

$$U_{ab} = \langle u_a | U | u_b \rangle, \ V_{ab} = \langle u_a | V | u_b \rangle,$$

$$\text{および，} \ |v_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{b=0}^{n-1} e^{i(2\pi ab/n)} |u_b\rangle = \sum_{b=0}^{n-1} W^*_{ab} |u_b\rangle. \tag{6.26}$$

また $|u_a\rangle = |a\rangle_u$，$|v_b\rangle = |b\rangle_v$ のように記す．

$n = 2$ の場合．

$$U = U^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad V = V^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$W = W^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \tag{6.27}$$

$$|0\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=0}^{1} e^{i(2\pi \times 0/2)j} |j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_u + |1\rangle_u). \tag{6.28}$$

$$|1\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=0}^{1} e^{i(2\pi \times 1/2)j} |j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_u - |1\rangle_u). \tag{6.29}$$

$n = 3$ の場合．

$$U=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\quad U^\dagger=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix}, \tag{6.30}$$

$$V=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&c&0\\0&0&c^*\end{pmatrix},\quad W=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1&1&1\\1&c^*&c\\1&c&c^*\end{pmatrix}. \tag{6.31}$$

ここで $c=e^{i2\pi/3}$ であり, $c+c^*+1=2\cos 2\pi/3+1=0$ などを使えば，ユニタリー行列であることは確かめられる.

$n=4$ の場合.

$$U=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\end{pmatrix},\quad V=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\1&i&0&0\\0&1&-1&0\\0&0&0&-i\end{pmatrix},$$

$$W=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&1&1&1\\1&i&-1&-i\\1&-1&1&-1\\1&-i&-1&i\end{pmatrix}. \tag{6.32}$$

6.2.2 周期系の干渉

量子力学の核心は干渉効果であるとよく言われる．しかし古典的な「干渉」のイメージは連続変数の連続的な波動の間の干渉である．ところが，量子力学での「波動」に相当する状態ベクトルは本章で論議したように，状態を区別する変数は $n=1,2,3,\cdots$ のように離散的でありかつ有限である．特に後の章で見るように，二状態の場合が重要な活躍をする．この二状態の干渉は連続波動での干渉とは同じ言葉で表現してもイメージは大分違っている．そこで，ここでは n を変えることによって，干渉効果の現れ方がどう変化するか見てみる．

先述のように, $n\to\infty$ の極限では，変数 (u,v) は粒子運動の変数 q,p に対応するものであった．この対応で言うと「$p(v)$ の異なる状態間での干渉効果を $q(u)$ を変数としてみる」の計算を行う．まず,「重なった状態」$|\psi_{\alpha\beta}\rangle=a_\alpha|\alpha\rangle_v+a_\beta|\beta\rangle_v$ を考える．ここで α,β は変数 v の状態を表す整数であり，これらの状態ベクトルは変数 v の状態ベクトルと次の関係にある.

$$|\alpha\rangle_v=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{j=0}^{n-1}e^{i(2\pi\alpha/n)j}|j\rangle_u. \tag{6.33}$$

干渉効果をみるということは，状態 $\psi_{\alpha\beta}$ での確率オペレータ $\Pi_j = |j\rangle_{uu}\langle j|$ の期待値の j の変化に対する振る舞いをみることである．

期待値は

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}(j) &= \langle\psi_{\alpha\beta}||j\rangle_{uu}\langle j||\psi_{\alpha\beta}\rangle \\ &= \frac{1}{n}\left[1 + 2|a_\alpha a_\beta|\cos\left(\frac{2\pi(\alpha-\beta)}{n}j + \phi\right)\right] \\ &= \frac{1}{n}[1 + I_{\alpha\beta}(j)] \end{aligned} \tag{6.34}$$

のように計算できる．ここで $[\cdots]$ の第二項 $I_{\alpha\beta}$ が干渉効果を表す．$|a_\alpha|^2 + |a_\beta|^2 = 1$，$a_\alpha a_\beta^* = |a_\alpha a_\beta|e^{i\phi}$，$\sum_{j=0}^{n-1} P_{\alpha\beta}(j) = 1$．

$n = 2, 3, 5, 10, 20$ の場合について，干渉項の振る舞いを図示してみた．ここでは何れの場合でも $|a_\alpha| = |a_\beta|$，$\phi = \pi/2$，$\alpha - \beta = 1$ とする．横軸は，有限な空間を各々n 個に分割し，区間を左から $j = 0, 1, \cdots$ とする．各区間での $I_{\alpha\beta}(j)$ の値を適当な長さの横棒で図示してある．n が大きくなると，連続波動

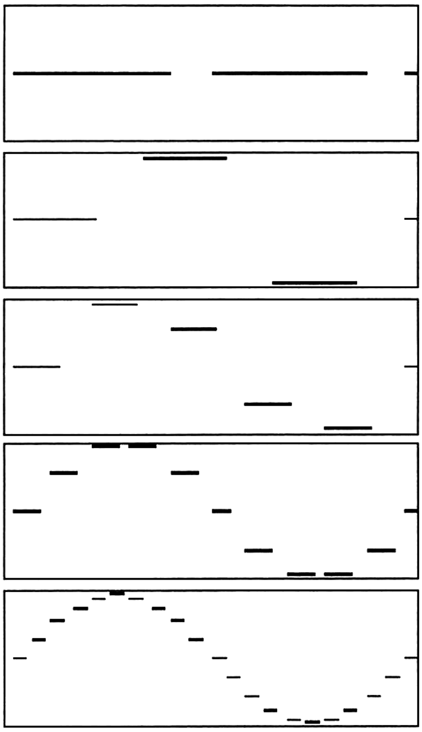


図 6.1　干渉項の図示．何れの図でも $|a_\alpha| = |a_\beta|$，$\phi = \pi/2$，$\alpha - \beta = 1$．図は上から $n = 2, 3, 5, 10, 20$．横軸は，有限な空間を n 個に分割し，区間を左から $j = 0, 1, \cdots$ とする，各区間での $I_{\alpha\beta}(j)$ の値を適当な長さの横棒で図示した．n が大きくなると，連続波動での干渉に近くなることが見て取れる．

での干渉のイメージになることが見て取れる．しかし量子力学での干渉効果は n が少ない場合でも効果を発揮していることが重要である．波動性に引きずられない視点が必要である．

第 7 章
シュレディンガーの方程式

前二章で状態ベクトルとオペレータという数理ツールを導入したが，この枠組みの中に第 1 章に記したような従来から馴染みのあるシュレディンガー方程式や波動関数を位置づけてみる．また波動関数の他の表示法についても考える．

さらに自由運動の最小不確定度による分類と時空座標の変換と波動関数の関係についても考える．

7.1 p と q の量子力学

7.1.1 q 状態のシフト変換

シュレディンガー方程式から始まる量子力学では，状態ベクトルとそれを変換させる作用素という量子力学本来の枠組みが明快には見えにくい．この章では (q, p) での量子力学を状態ベクトルとユニタリー演算子の理論の枠で整理して再述してみる．

まず $\hat{q}$ という演算子の固有状態が q である状態ベクトルを $|q\rangle$ と書き

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle \tag{7.1}$$

である．ここで状態ベクトルを

$$U|q\rangle = |q+\epsilon\rangle \tag{7.2}$$

のようにシフト変換させる演算子を導入する．$\langle q'|U^\dagger U|q\rangle = \langle q'+\epsilon|q+\epsilon\rangle$ だから，$\langle q'|q\rangle = \delta_{q'q}$ の規格化条件から，U は $U^\dagger U = 1$ という条件を満たすユニタリー演算子である．固有値の方程式 (7.1) に左から U を作用させ，また U がユニタリー演算子 $U^\dagger U = \hat{1}$ であることを用いれば

$$U\hat{q}U^\dagger(U|q\rangle) = q(U|q\rangle) \quad \text{すなわち} \quad U\hat{q}U^\dagger|q+\epsilon\rangle = q|q+\epsilon\rangle \tag{7.3}$$

となる．したがって U により演算子 $\hat{q}$ も次のように変換を受ける．

$$U\hat{q}U^\dagger = \hat{q} - \epsilon,\ U^\dagger\hat{q}U = \hat{q} + \epsilon. \tag{7.4}$$

次に固有状態ベクトル $|q\rangle$ に成分 $\psi(q)$ をかけて足し合わせた一般の状態ベクトル

$$|\Psi\rangle = \sum_q \psi(q)|q\rangle,\quad ただし\ \langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \tag{7.5}$$

を導入する．ここで U はベクトルに作用するものとすれば

$$U|\Psi\rangle = \sum_q \psi(q)|q+\epsilon\rangle = \sum_q \psi(q-\epsilon)|q\rangle. \tag{7.6}$$

ここで最後の式は $\sum_{q=-L}^{L} \to \sum_{q=-L+\epsilon}^{L+\epsilon}$ のような和の置き換えを行ったことにあたるが，関心のある q の領域から十分外れた領域（$q=-L$ や $q=L$）では $\psi(q)=0$ であるから影響なしという想定に立っている．

7.1.2　シフト変換の演算子

機能面から形式的に導入されたオペレータという数理概念と微分積分というより馴染みのある演算を関連づけてみる．関数 $\psi(q-\epsilon)$ のテイラー展開では

$$\psi(q-\epsilon) = 1 - \epsilon\frac{d}{dq}\psi(q) + \frac{1}{2!}\epsilon^2\frac{d^2}{dq^2}\psi(q) - \cdots = e^{-\epsilon\frac{d}{dq}}\psi(q) \tag{7.7}$$

のように，微分記号を指数の肩にのせた演算子が関数に作用したようなようになっている．ここで $(\hbar/i)\partial/\partial q = \hat{p}$ を思い起こすと

$$e^{-\epsilon\frac{d}{dq}} = e^{-j\epsilon\hat{p}/\hbar} = U \tag{7.8}$$

となる．さらにこの U を $\hat{q}$ の変換に用いると，ϵ の一次のオーダーで，

$$U\hat{q}U^\dagger = \hat{q} + \epsilon\frac{i}{\hbar}(\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q}) + \cdots. \tag{7.9}$$

ここで，交換関係 $\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar$ を用いると (7.4) 式が再現される．

パラメータが有限な大きさの変換は，オペレータについて線形な微小変換 $(|\alpha|/N \ll 1)$ の繰り返しと考えることができる．この結果，次のようにオペレータの指数化になるのである．

$$U = \lim_{N\to\infty}\left(1 + \frac{\alpha}{N}\hat{A}\right)^N = e^{\alpha\hat{A}}. \tag{7.10}$$

そして U が $U^\dagger U = 1$ であるためには，$\hat{A}$ が自己共役だから $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, $\alpha^* = -\alpha$ である．したがって，β を実数として，

$$U = e^{i\beta\hat{A}} \tag{7.11}$$

の形になる．

U の変換による期待値の変化は

$$(\langle\Psi|U^\dagger)\hat{q}(U|\Psi\rangle) = \langle\Psi|(U^\dagger\hat{q}U)|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{q}|\Psi\rangle + \epsilon \tag{7.12}$$

であり，状態の変換 $(U|\Psi\rangle)$ または演算子の変換 $(U^\dagger\hat{q}U = \hat{q}+\epsilon)$ の何れかの変換を行うことである．$\epsilon > 0$ で考えると $U^\dagger\hat{q}U$ という変換は q の座標原点を左に移動させることである．関数 $\psi(q)$ を不動のまま座標軸だけ左に動かすことは，座標を不動のまま関数の形を右に移動させるのと同等である．この関係は第 3 章の正準変換の議論で見た，座標変換と運動の関係と同じである．$\hat{q}$ の微小正準変換の生成演算子が $\hat{p}$ であり，量子力学の U ではこの演算子が指数の肩にのっているのである．

7.2 時間の移動：ハイゼンベルグ運動方程式とシュレディンガー方程式

7.2.1 オペレータの時間変換：ハイゼンベルグの運動方程式

解析力学では時間変化を正準変換の一種と見なす．時間というパラメータで区別された状態間の変換である.「運動」には「生成される」というイメージがあるが変換理論の見方ではあくまでも用意された状態のセットの間を渡り歩くことである．

時間 Δt ずらすユニタリー変換 $U(\Delta t)$ はシュレディンガー流には

$$U(\Delta t)|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t+\Delta t)\rangle \tag{7.13}$$

で特徴づけられるが，ハイゼンベルグ流ではこれはオペレータ $\hat{A}$ が時間的に変化する変換である．

$$U(\Delta t)^\dagger \hat{A}(t) U(\Delta t) = \hat{A}(t+\Delta t). \tag{7.14}$$

一方，3.2.4 節で見たように時間変換を生成する演算子はハミルトニアン H であるから，

$$U(\Delta t) = e^{-i\Delta t\frac{\hat{H}}{\hbar}} \tag{7.15}$$

で与えられる．$U(\Delta t) \sim 1 - i\Delta t\frac{\hat{H}}{\hbar} + \cdots$ の近似で上式を書き換えると

$$i\hbar\frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{A}, \hat{H}] \tag{7.16}$$

となる．これがハイゼンベルグの運動方程式である．

7.2.2 状態ベクトル成分の時間変換：シュレディンガー方程式

状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の変化を，固定した基底ベクトル $|q\rangle$ のもとで展開した際のベクトルの成分の変化で表すことにすると

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_q \psi(q,t)|q\rangle \tag{7.17}$$

である．ここで Δt だけ進んだ時刻の状態に変換するユニタリー変換 $U(\Delta t)$ では $U(\Delta t)|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t+\Delta t)\rangle$ であるが，これを $U(\Delta t) \sim 1 - i\Delta t\frac{\hat{H}}{\hbar} + \cdots$ の近似の下に，書き換えると

$$|\Psi(t+\Delta t)\rangle - |\Psi(t)\rangle = -i\Delta t\frac{\hat{H}}{\hbar}|\Psi(t)\rangle,$$

そして $\Delta t \to 0$ の極限を取れば

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{7.18}$$

となる．ここで各 $|q\rangle$ の成分ごとに等しいとおけば

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t) = H\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q,t) \tag{7.19}$$

という，シュレディンガー方程式が現れる．この右辺は

$$H\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q,t) = \sum_{q'}\langle q|\hat{H}|q'\rangle\psi(q',t) \tag{7.20}$$

の意味である．

7.2.3 相互作用表示：ディラック流

時間変化を全てオペレータ（ハイゼンベルグ流）或いは状態ベクトル（シュレディンガー流）の何れかに押し付けるのではなく，何れにも部分的に組み込む手法が散乱問題などの解法には有効である．いま $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ のように与えられ，$H_0 u_i = E_i u_i$ となるエネルギー固有関数 u_i が得られるとする．

$$U_D(t,t_0) = \sum_i u_i u_i^* e^{-iE_i(t-t_0)}$$

として，

$$|\psi(t)\rangle_D = U_D|\psi(t_0)\rangle. \tag{7.21}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle_D = \hat{V}_D|\psi\rangle_D, \tag{7.22}$$

$$\text{ここで}\quad \hat{V}_D = U_D^\dagger \hat{V} U_D,\ i\hbar\frac{d}{dt}\hat{V}_D = [\hat{V}_D, \hat{H}_0]. \tag{7.23}$$

7.2.4 連続変数極限での確率

基底ベクトル $|q\rangle$ による展開を，これまでは q が離散的な数であるかのように扱ってきた．その方がベクトルの観念にはイメージし易いからである．連続の極限は次のように考えればよい．まず区間を ϵ として ($\Delta q = q_{k+1} - q_k = \epsilon$), $q_k = \epsilon k$ のように，q と整数 k を対応させる．そして $|q\rangle$ の代わりに k で分類された基底 $|u_k\rangle$，ただし $\langle u_{k'}|u_k\rangle = \delta_{k'k}$，を導入して

$$|\Psi\rangle = \sum_k \psi(k)|u_k\rangle, \ \langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_k |\psi(k)|^2 = 1. \tag{7.24}$$

$\epsilon \to 0$ での $|q\rangle$ との関係は，$|u_k\rangle \to |q_k\rangle\sqrt{\epsilon}$ と書いて

$$\langle q_{k'}|q_k\rangle = \frac{\langle u_{k'}|u_k\rangle}{\epsilon} = \frac{\delta_{k'k}}{\epsilon} \to \delta(q_{k'} - q_k) \tag{7.25}$$

である．これを使うと規格化は

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{k'}\sum_k \psi^*(k')\psi(k)\langle q_{k'}|q_k\rangle\epsilon$$

$$\to \int \psi^*(q)\psi(q)dq = \int |\psi(q)|^2 dq = 1. \tag{7.26}$$

期待値は

$$\langle q\rangle = \langle\Psi|\hat{q}|\Psi\rangle = \langle\Psi|(\sum_k q_k|u_k\rangle\langle u_k|)|\Psi\rangle = \sum_k q_k|\psi(k)|^2\epsilon$$

$$\to \int q|\psi(q)|^2 dq. \tag{7.27}$$

確率は

$$\Pr(k) = \langle\Psi|\hat{\Pi}_k|\Psi\rangle = |\langle u_k|\Psi\rangle|^2 = |\psi(k)|^2$$

$$\to |\langle q|\Psi\rangle|^2\epsilon = |\psi(q)|^2\Delta q. \tag{7.28}$$

連続変数では基底ベクトルの規格直交条件が積分を使って書き表されるので，積分変数の物理的次元が混入し，この次元の調整のために基底ベクトル $|q\rangle$ やベクトルの成分 $\psi(q,t)$ に次元が乗り移る．このために，シュレディンガー方程式から量子力学を学習すると，ベクトルの成分に当たるシュレディンガー波動関数は次元を持つものとして登場する．しかしヒルベルト空間のベクトルは本来的に物理的次元を持たない確率を計算するものであるから，次元を持つ $\psi(q,t)$ に最初に接するのは量子力学の理論について誤った印象を与える．

7.3 波動関数のいろいろな表現法

7.3.1 プロパゲータ

ある時刻での状態ベクトルが $\hat{H}|u_i\rangle = E_i|u_i\rangle$ なる固有状態のセット $|u_i\rangle$ の重ね合わせで

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_i \alpha_i|u_i\rangle \tag{7.29}$$

で与えられている時に，それから時間が $t - t_0$ 経った時刻での状態 $|\psi(t)\rangle$ を書き下すことを考える．

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle = \sum_i e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar}\alpha_i|u_i\rangle. \tag{7.30}$$

一方，$\alpha_i = \langle u_i|\psi(t_0)\rangle$ だから，上式は次のように書ける．

$$|\psi(t)\rangle = \hat{K}|\psi(t_0)\rangle, \ \hat{K} = \sum_i e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar}|u_i\rangle\langle u_i|. \tag{7.31}$$

ここで $\hat{K}$ はプロパゲータ (propagator) と呼ばれる．

ここでさらに $|u_i\rangle$ の q 表示で書くことにすれば $\int |q\rangle dq\langle q| = \hat{1}$ だから

$$\langle q'|\psi(t)\rangle = \int \langle q'|\hat{K}|q\rangle dq\langle q|\psi(t_0)\rangle. \tag{7.32}$$

ここでプロパゲータを

$$K(q',t;q,t_0) = \langle q'|\hat{K}|q\rangle = \sum_i e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar}u_i(q')u_i^*(q) \tag{7.33}$$

と書けば，状態ベクトルの成分すなわちシュレディンガー波動関数について次のような形に書くことができる．

$$\psi(q',t) = \int K(q',t;q,t_0)\psi(q,t_0)dq. \tag{7.34}$$

結果からみれば途中にエネルギーの固有状態を登場させずに

$$\langle q'|\psi(t)\rangle = \int \langle q'|e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|q\rangle\langle q|\psi(t_0)\rangle dq \tag{7.35}$$

と置けば，K は一般的に次のように書ける．

$$K(q',t;q,t_0) = \langle q'|e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|q\rangle. \tag{7.36}$$

7.3.2 経路積分

$|q,t\rangle = e^{i\hat{H}t/\hbar}|q\rangle$, $|q_2\rangle = e^{i\hat{p}(q_2-q_1)/\hbar}|q_1\rangle$ などの関係を使って

$$K(q_2,t_2;q_1,t_1) = \langle q_2,t_2|q_1,t_1\rangle$$

と表示する．

$$\langle q_2,t_2|q_1,t_1\rangle = \langle q_1|e^{i\hat{p}(q_2-q_1)/\hbar}e^{-i\hat{H}(t_2-t_1)/\hbar}|q_1\rangle. \tag{7.37}$$

いまこの関係に $\int |p_1\rangle dp_1\langle p_1| = \hat{1}$ を挿入して，指数にある $\hat{p}, \hat{H}(\hat{q},\hat{p})$ の q,p を c-数に変えることができる．その結果，$\delta t = t_2 - t_1$，$\delta q = q_2 - q_1$ と書いて

$$\langle q+\delta q, t+\delta t|q,t\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp e^{i(-H(q,p)\delta t + p\delta q)/\hbar}. \tag{7.38}$$

ここで $\langle q|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}e^{ipq/\hbar}$ を用いた．

いま $H = p^2/(2m)+V(q)$ であれば p について形式的に積分し，また $\delta q = \dot{q}\delta t$ と置き換えると

$$\langle q+\delta q, t+\delta t|q,t\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}}e^{i\delta t L(q,\dot{q})/\hbar}. \tag{7.39}$$

ここで $L = m\dot{q}^2/2 - V(q)$ はラグランジアンである．

時間的な遷移を記述するプロパゲータには，$t_3 > t_2 > t_1$ として，

$$\langle q_3, t_3|q_1, t_1\rangle = \int dq_2 \langle q_3, t_3|q_2, t_2\rangle\langle q_2, t_2|q_1, t_1\rangle \tag{7.40}$$

のような合成則が成り立つ．したがって有限時間の場合には $t - t' = n\delta t$ のように分割し，分割時刻での q についての積分が必要になる．このような計算は象徴的に次のように書くことにする．

$$\langle q, t|q', t'\rangle = \int Dq e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t} dt'' L(q,\dot{q})}. \tag{7.41}$$

ここで

$$Dq = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}\right)^{n/2} dq_1 dq_2 \cdots dq_{n-1}. \tag{7.42}$$

プロパゲータに対するこのような計算法は初めファインマンが提案したものであり，全ての時間的な経路についての和を取ることになっているので,「歴史に関する和 (sum over histories)」と呼ばれる時もある．しかしこの流儀は実際に適用できる問題は限定されており，実用的な有用性は低い．しかし，最後の表式に古典的な解析力学の第一原理である作用積分が登場していることは示唆的である．この視点でいうと古典軌道はプロパゲータに最も寄与する経路のことであるということになる．第 3 章の「最適選択理論」に類似する．

7.3.3 Wigner 関数

古典的な解析力学や統計力学においては系の状態を (p, q) を座標とする位相空間上に表現した．ところが量子力学では，シュレディンガー関数 $\psi(q, t)$ のように，p, q 対等ではなく何れか一方の変数（通常は q）で状態が表現される．そこで $\psi(q, t)$ の情報を p，q 対等の位相空間上に表現する次のような Wigner 関数 $W(q, p)$ が考案されている．(類似の試みは伏見康治によっても行われており Wigner–Husimi 関数とも呼ばれるときもある.)

$$W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(q + y/2)\psi(q - y/2)e^{ipy/\hbar}. \tag{7.43}$$

この $W(q, p)$ は次のような分布関数としての性質を持っている．

$$\iint W(q, p)dqdp = 1,\ |\langle\psi_1|\psi_2\rangle| = 2\pi\hbar\iint W_1 W_2 dqdp. \tag{7.44}$$

しかし，W は全ての q, p に対して $W(q, p) \geq 0$ という確率の分布関数が満たすべき条件を満たしてはいない．例えば $\psi(-q) = -\psi(q)$ のように q に対して奇関数ならば

$$W(0, 0) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int \psi^*(y/2)\psi(-y/2)dy = -\frac{1}{2\pi\hbar}\int \psi^*(y/2)\psi(y/2)dy \leq 0$$

である．このために規格化のような上式の関係にも拘らず，W を単純に位相空

間上の分布関数と見なすことはできない．むしろ，W が負の値を取ることは量子効果の現れであり，規格化条件も古典の場合よりもより強い相関が現れることを示唆している．

7.4 Wignerの定理：ユニタリー変換と反ユニタリー変換

エネルギー固有状態の波動関数は $H(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q})u_i(q) = E_i u_i(q)$ なる $u_i(q)$ を用いて

$$\psi(q,t) = e^{-iE_it/\hbar}u_i(q)$$

である．ここで，時間反転 $t \to -t$ の変換に対して物理法則は同じであるべきと考えて，$\psi(q,t)$ の代わりに $\psi(q,-t)$ をシュレディンガー方程式 (7.19) に代入すると $H(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q})u_i(q) = -E_i u_i(q)$ という誤った結論に導かれる．すなわち，$\psi(q,-t)$ は解ではなく $\psi^*(q,-t)$ が解であることが分かる．そして確かに，$t \to -t$ の変換に加えてシュレディンガー方程式の両辺の複素共役を取る変換をしないとシュレディンガー方程式の形は元に戻らないことから，時間反転の解は $\psi^*(q,-t)$ であることが分かる．これをもう少し一般的にみてみる．

いま状態 $|\psi\rangle$ と状態 $|\phi\rangle$ の間の重なりの大きさ（遷移確率に比例）$|\langle\psi|\phi\rangle|^2$ を考える．各々の状態を変換した別の座標で $|\psi'\rangle = W|\psi\rangle$, $|\phi'\rangle = W|\phi\rangle$ と表現したとする．すると，$|\langle\psi'|\phi'\rangle|^2 = |\langle\psi|\phi\rangle|^2$ であるのは，$\langle\psi'|\phi'\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$, または, $\langle\psi'|\phi'\rangle = \langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$, の二通りの場合がある．

座標変換に伴う状態ベクトルの変換を W と書けば，次の二通りの場合があると言ってもよい．

(1) $|\psi'\rangle = W|\psi\rangle = W\sum_i \alpha_i|a_i\rangle = \sum_i \alpha_i(W|a_i\rangle)$,
$|\phi'\rangle = W|\phi\rangle = \sum_i \beta_i|b_i\rangle = \sum_i \beta_i(W|b_i\rangle)$,

(2) $|\psi'\rangle = W|\psi\rangle = W\sum_i \alpha_i|a_i\rangle = \sum_i \alpha_i^*(W|a_i\rangle)$,
$|\phi'\rangle = W|\phi\rangle = W\sum_i \beta_i|b_i\rangle = \sum_i \beta_i^*(W|b_i\rangle)$.

(1) の場合の $W = \hat{1}$ が含まれるから W はユニタリー変換であるが，(2) の場合はそうではなく W は反ユニタリー変換と呼ばれる．反ユニタリー変換は連続的なパラメータで繋がっていない非連続的なジャンプを伴う変換である．$|\langle\psi|\phi\rangle|^2$ が同一という条件は二つの可能性を指摘しており，これは Wigner の定理と呼ばれる．

時間反転変換 T は非連続的なジャンプを伴う変換であり

$$|\psi'\rangle = T|\psi(q,t)\rangle = \sum_q \psi^*(q,-t)|q\rangle \tag{7.45}$$

のように波動関数は反ユニタリーを受けるとせねばならない．ここで時間反転変換で $T\hat{H}T^\dagger = \hat{H}$ であることを用いている．

この時間反転変換と違い空間反転変換はユニタリー変換であることが示せる．

鏡像変換とは一つの座標軸の方向を反転させることである．この座標と三つの座標軸を反転させた座標系は連続変換で結びついているから同じである．また二つの座標軸を反転させたものは連続的に元に戻せる．$q \to -q$ の空間反転変換 P を行えば $|\psi'\rangle = P|\psi\rangle$, $|\phi'\rangle = P|\phi\rangle$,

$$\begin{aligned}\langle\phi'|\psi'\rangle &= \int_{-L}^{L} \phi'(q)\psi'(q)dq = \int_{-L}^{L} \phi(-q)\psi(-q)dq \\ &= \int_{-L}^{L} \phi(q)\psi(q)dq = \langle\phi|\psi\rangle \end{aligned} \tag{7.46}$$

であるから，ユニタリー変換である．

コラム7　量子力学理論の誕生とノーベル賞

量子力学理論への出発点は1917年のアインシュタインの放射遷移の確率 A, B である（コラム3）．原子の離散的なエネルギー準位の間の遷移（ジャンプ）ではエネルギー差の光子の放出・吸収が伴う．1917年論文はこの遷移過程に確率係数を導入した．高い準位から低い準位に遷移する平均寿命という確率の考えは放射性核についてのラザフォードの考えを取り入れたものであった．4.3節のように，この係数を計算する試みの中で，ハイゼンベルグの理論が誕生した．

一方，ド・ブロイの物質波のアイデアを発展させて原子のエネルギー準位を導出してみせたのがシュレディンガーであった．4.3節を参照．

誕生史の年表は次のようになる，

1917年	アインシュタイン	遷移の確率
1924年	ボーア–クラマース–スレーター (BKS)	遷移確率の結合則
1925年	ハイゼンベルグ	BKS結合則の力学，ボルン–ヨルダン行列
	ディラック	交換関係
1926年	シュレディンガー	波動方程式でボーア準位導出
	ボルン	ψ の 確率解釈
	ボルン–ハイゼンベルグ–ヨルダン	行列力学
	ディラック	行列力学と波動力学の同等性
1927年	フォン・ノイマン，ランダウ	密度行列導入
	ボーア，ハイゼンベルグ	相補性，不確定関係，
1928年	ハイゼンベルグ–パウリ	場の量子論
	ディラック	相対論的電子場の理論

量子力学の理論誕生へのノーベル賞は，1933年になって，保留になっていた1932年分を含めて，ハイゼンベルグ，シュレディンガー，ディラックの三人の同時受賞となった．三人揃っての授賞式であったが，ハイゼンベルグは32年度の一人受賞，他の二人は33年度の共同受賞だから賞金はハイゼンベルグの半分だった．未婚のディラックには母親が同伴した．

賞のサイテーションを見ると，ハイゼンベルグには一見無関係な水素の同位体としての重水素の説明が追加されており，ディラックには陽電子を予測したディラック方程式が追加されている．1932年は中性子，陽電子，重水素などの発見が相次いだ年だった．当時のノーベル賞は一般理論の顕彰は避けて必ず具体的なモノの解明を必須条件としており，前年の発見と絡めた業績を付加することで一般理論での授与に踏み切ったと推察される．

実は量子力学理論へのノーベル賞は1954年度のボルンの波動関数の確率解釈で完結した．ボルンは当時既に教授であり，ハイゼンベルグ理論の完成にもヨルダンと共同で貢献した．では何故，ボルンだけが後回しになったかについてはナチに協力したヨルダンの扱いに苦慮したからと見られている．

第 8 章
角運動量の固有状態

回転変換を司る角運動量オペレータの固有状態を考察する．物理的意味を有するためには回転変換された状態ベクトルもヒルベルト空間のベクトルでなければならない．この要請が可能な固有状態の分類や可能な状態の決定に大事な指針を与える．

8.1 回転変換の生成子としての角運動量

8.1.1 回転変換のオペレータ

三次元空間にある方向を定め，その軸周りの角度 ϕ の回転を考える．回転軸に垂直な二次元平面にデカルト座標軸の基底ベクトルを $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2$ ととれば，この回転によって基底ベクトルは次のように変換される．

$$R(\phi)\boldsymbol{e}_1 = \cos\phi\, \boldsymbol{e}_1 - \sin\phi\, \boldsymbol{e}_2,$$

$$R(\phi)\boldsymbol{e}_2 = \sin\phi\, \boldsymbol{e}_1 + \cos\phi\, \boldsymbol{e}_2,$$

すなわち回転変換の行列は次のようになる．

$$R(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}. \tag{8.1}$$

ここでパラメータが微小な $d\phi$ の場合に考えると

$$R(d\phi) = \begin{pmatrix} 1 & -d\phi \\ d\phi & 1 \end{pmatrix}. \tag{8.2}$$

(7.11) 式でみたように，エルミット自己共役な演算子 J の作用に伴うユニタリー変換は，変換の大きさを決めるパラメータを ϕ として，$\hat{R}(\phi) = e^{-i\phi J/\hbar}$ の形になる．一方，$\hat{R}(d\phi) = \hat{1} - i(J/\hbar)d\phi$ だから

$$J/\hbar = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{8.3}$$

そして $(J/\hbar)^2 = 1$ だから，指数関数のテイラー展開をすることで

$$e^{-i(J/\hbar)\phi} = \hat{1}\cos\phi - i(J/\hbar)\sin\phi = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}. \tag{8.4}$$

ここで空間ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ の回転演算子 $R(\phi)$ とそれに伴うユニタリー変換 $\hat{R}(\phi)$ の関係を見てみる．回転変換には三次元空間での回転軸方向 $\boldsymbol{n}$ を定めねばならず J は三次元空間での角運動量ベクトルを $\boldsymbol{J}$ とすれば $J = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$ だから

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi) = e^{-i\phi\hat{J}_n/\hbar}, \quad \hat{J}_{\boldsymbol{n}} = \hat{\boldsymbol{J}}\cdot\boldsymbol{n} \tag{8.5}$$

と書ける．その上で $\boldsymbol{n}$ を別の方向に移動する一般の回転変換 R を考えると

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}'}(\phi) = R\hat{R}_{\boldsymbol{n}}R^{-1}, \quad \boldsymbol{n}' = R\boldsymbol{n}. \tag{8.6}$$

ここで $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)^{-1} = 1$．また $\hat{J}_{\boldsymbol{n}} = (d\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)/d\phi)_{\phi=0}$ であるから

$$\hat{J}_{\boldsymbol{n}'} = R\hat{J}_{\boldsymbol{n}}R^{-1}. \tag{8.7}$$

このように回転に伴うユニタリー変換は三次元空間のベクトルの回転変換から計算できる．

8.1.2 角運動量の交換関係

角運動量ベクトルのオペレータとしての表現は，i 軸周りの回転変換 $R_i(\phi)$ の生成子は $\hat{J}_i = (dR_i(\phi)/d\phi)_{\phi=0}$ のように計算される．三つの軸の周りの回転変換の生成子は次のようになる．

$$J_1 = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \ J_2 = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_3 = \hbar\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{8.8}$$

これらの行列は次の交換関係を満たす．

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k. \tag{8.9}$$

ここで ϵ_{ijk} は，$\epsilon_{123} = \epsilon_{312} = -\epsilon_{213} = \cdots = 1, \quad \epsilon_{113} = \epsilon_{223} = \cdots = 0$ などの関係を満たす．

一般の方向の回転もこれら座標軸周りの回転の組み合わせで実現できることが知られている．例えば剛体の回転を表すために導入されたオイラー (Euler) 角は一つの標準的な方法である．これらは次のように三段階の J_i に対する変換の組み合わせで与えられる．

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = R_3(\alpha)R_2(\beta)R_3(\gamma). \tag{8.10}$$

8.2 角運動量オペレータの固有状態

8.2.1 ヒルベルト空間の要請と有限個の固有値

角運動量ベクトルの各成分が満たすべき交換関係 (8.9) が与えられている．以下では，煩雑さを避けるため，オペレータであることを強調した $\hat{J}$ という記法は省略し，単に J と書く．また $J_i/\hbar \to J_j$ のように無次元で考える．

いま演算子 J_1, J_2, J_3 から $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$，$J_\pm = J_1 \pm iJ_2$ を構成すると，交換関係から

$$[J^2, J_3] = 0,\ [J_3, J_+] = J_+,\ [J_3, J_-] = -J_-,\ [J_+, J_-] = J_3 \tag{8.11}$$

などの新たな交換関係が得られる．

まず J^2 と J_3 は交換するから，固有状態はこの二つの固有値で分類される．

$$J^2|\alpha, m\rangle = \alpha|\alpha, m\rangle,\ J_3|\alpha, m\rangle = m|\alpha, m\rangle. \tag{8.12}$$

ここで $\alpha \geq 0$ である．また $J_3J_+ = [J_3, J_+] + J_+J_3 = J_+ + J_+J_3$ だから，

$$J_3J_+|\alpha, m\rangle = (J_+ + J_+J_3)|\alpha, m\rangle = (m+1)J_+|\alpha, m\rangle. \tag{8.13}$$

これは規格因子を A として $|\alpha, m+1\rangle = AJ_+|\alpha, m\rangle$，あるいは，$J_+|\alpha, m\rangle = 0$ を意味する．同様な議論で $|\alpha, m-1\rangle = BJ_-|\alpha, m\rangle$，あるいは，$J_-|\alpha, m\rangle = 0$ である．この性質から J_+ は昇演算子．J_- は降演算子と呼ばれる．

演算子で生成されたベクトルもヒルベルト空間のベクトルだから，ベクトルの大きさが $\langle\alpha, m|J_-J_+|\alpha, m\rangle \geq 0$ であるという要請がある．他方，$J_-J_+ = J^2 - J_3 - J_3^2$ だからこの要請を満たすには $\alpha - m(m+1) \geq 0$ である．従ってある α に対して有限の範囲の m のみが許される．さらに例えば J_+ で m を増加させていった場合，ある $m = j$ で $J_+|j\rangle = 0$ となることが必要である．どこかで $J_+|j\rangle = 0$ にならないと，大きさが負のベクトルができてしまうからである．従って，α はこの m の上限 j で $\alpha = j(j+1)$ と決まっていることになる．J_- についても同様で，m の最低値があることになる．$J_+J_- = J^2 + J_3 - J_3^2$ だから，$J_-|j'\rangle = 0$ となる下限の j' は $j(j+1) + j' - j'^2 = 0$ から $j' = -j$ となる．

すなわち $j \geq m \geq -j$ であり，間隔が 1 のステップが $2j$ 個存在する．ということは $2j = 0, 1, 2, 3, \cdots$ を意味しており，$j = 0, 1/2, 1, 3/2, \cdots$ のように半整数および整数の j が許されることになる．

次元と規格化の定数を入れてオペレータの状態ベクトルへの作用をまとめると次のようになる．

$$J^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle,\ J_3|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle, \tag{8.14}$$

$$J_\pm|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\hbar|j, m\pm 1\rangle. \tag{8.15}$$

8.2.2 パウリ行列

いま j の最小値である $j = 1/2$ の場合を考えると，m は $-1/2$ と $1/2$ の二値を取る．いま $J_j = \frac{1}{2}\hbar\sigma_i$ と書いて，交換関係式の $[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar J_k$ に代入すると，σ_i は次の関係を満たす．

$$\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z, \quad \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y = 2i\sigma_x,$$

$$\sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z = 2i\sigma_y. \tag{8.16}$$

これらの関係を満たす σ_i としては次のパウリ (Pauli) 行列と呼ばれる次の三組が標準的に多用される．

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{8.17}$$

これらは次の関係も満たす．

$$\sigma_i^2 = 1, \quad \text{異なる } i,\ j,\ k \text{ に対して} \quad \sigma_j\sigma_k = -\sigma_k\sigma_j, \ \sigma_i\sigma_j = i\epsilon_{ijk}\sigma_k. \tag{8.18}$$

8.2.3 軌道角運動量の固有関数

前小節では角運動量オペレータ J_i の交換関係から固有状態の議論をしたが，他方で軌道角運動量 J_i は $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}$ のように三次元空間の座標とそれに共役な運動量から構成されるものである．したがって，$\boldsymbol{J}$ の固有状態は空間座標の関数として表現することも可能なはずである．

三次元空間の座標をデカルト座標 $\boldsymbol{x}$ から球座標 (r, θ, ϕ) に変換すると，J_i は次のように表される．

$$J_x = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \tag{8.19}$$

$$J_y = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \tag{8.20}$$

$$J_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{8.21}$$

また，これより

$$J_\pm = \hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{8.22}$$

である，J_i は球座標 (r, θ, ϕ) のうち r には依存しないことが分かる．

$|j, m\rangle$ という固有状態ベクトルを θ, ϕ の関数として書くことは，状態ベクトルを，$\sum_{\theta\phi} |\theta, \phi\rangle\langle\theta, \phi| = \hat{1}$ という新たなスペクトル分解に対応した基底ベクトルで展開することである．すなわち

$$|j, m\rangle = \sum_{\theta,\phi} f^{jm}_{\theta,\phi}|\theta, \phi\rangle, \quad f^{jm}_{\theta,\phi} = \langle\theta, \phi|j, m\rangle. \tag{8.23}$$

ここで，状態ベクトルは j, m のように二つの添字を持つからテンソルとも言えるが，ここではそれも含めてベクトルと呼んでおく．また連続変数 θ, ϕ であるが，ベクトルという用語のイメージを持たすためにここでは和で書いてある．$(J_z/\hbar)|j,m\rangle = m|j,m\rangle$ だから

$$(J_z/\hbar)|j,m\rangle = \sum_{\theta,\phi} m f^{jm}_{\theta,\phi}|\theta,\phi\rangle = \sum_{\theta,\phi} -i\frac{\partial}{\partial\phi} f^{jm}_{\theta\phi}|\theta,\phi\rangle \tag{8.24}$$

と書けるが，ベクトルの等式では各成分が等しくなければならないから

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi} f^{jm}_{\theta\phi} = m f^{jm}_{\theta,\phi} \quad \text{であり，積分して}\ f^{jm}_{\theta\phi} = f^{jm}(\theta)e^{im\phi}. \tag{8.25}$$

ここで θ, ϕ は添字であるが関数の変数状に書くことにする．

ここで $|j,m\rangle$ が満たすべきもう一つの条件 $J_-|j,-j\rangle = 0$ を使うと

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + j\cot\theta\right) f^{j,-j}(\theta) = 0 \tag{8.26}$$

を満たすこととなり，$f^{j,-j}_\theta = A\sin^j\theta$ と積分できるから

$$f^{j,-j}(\theta,\phi) = A\sin^j\theta e^{-ij\phi} \tag{8.27}$$

の形に求められる．A は規格化条件から決まる．$f^{j,-j}(\theta,\phi)$ が決まれば $-j \leq m \leq j$ の m の固有関数は

$$f^{j,m+1}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}}(J_+/\hbar) f^{j,m}(\theta,\phi) \tag{8.28}$$

のように昇演算子 J_+ を次々と作用させることで得られる．例えば，$j=1$ の場合には $f^{j,m}(\theta,\phi)$ は

$$Y^{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}, \quad Y^{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \tag{8.29}$$

のように求められる．このように $|j,m\rangle$ を θ,ϕ 座標で表現した関数は球関数，球面調和関数，ルジャンドル関数などと関連したものである．

交換関係を基礎にした議論では j は半整数を取ることができたが，ここで求めた固有関数は $e^{im\phi}$ の項から明らかなように，半整数の m では，$\phi = 0$ と $\phi = 2\pi$ が同一点なのに符号が一致しなくなり，固有関数の一義性が成り立たない．一義性を要求すれば $j = 0, 1, 2, \cdots$ と整数に限られることになる．逆に，半整数の場合というのは $\hat{J}$ が $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}$ のように軌道を前提したものではないことを意味する．つまり軌道角運動量の j は整数であるといえる．

8.2.4 ベクトル・オペレータの回転変換

ここでは角運動量を含む一般のベクトル・オペレータ $\boldsymbol{A}$ に対する回転変換 $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)$ の作用を考える．回転変換を受けた後のベクトル・オペレータ $\boldsymbol{A}'$ は

$$\boldsymbol{A}' = \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)\boldsymbol{A}\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)^\dagger = \boldsymbol{A}_\parallel + \boldsymbol{A}_\perp \cos\phi + \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{A} \sin\phi. \tag{8.30}$$

ここで $\boldsymbol{A}_\parallel = \boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{A})$, $\boldsymbol{A}_\perp = \boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_\parallel$ は各々$\boldsymbol{A}$ の $\boldsymbol{n}$ に平行成分および垂直成分である．この関係式は c 数のベクトルの変換を幾何学的に考察すれば理解できることである．ここで ϕ について微分した後に $\phi = 0$ と置けば

$$(i/\hbar)(-(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})) = (i/\hbar)[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}] = -\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A} \tag{8.31}$$

という関係が得られる．$\boldsymbol{n}$ を座標軸 i 方向 $\boldsymbol{e}_i$ にとれば，$(\boldsymbol{e}_i)_k = \delta_{ik}$ だから，

$$(i/\hbar)[A_j, J_i] = -(\boldsymbol{e}_i \times \boldsymbol{A})_j = -\epsilon_{jkl}\delta_{ik}A_l = e_{ijl}A_l. \tag{8.32}$$

例えば $i = j$ なら $[A_i, J_i] = 0$ であるから，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$ となり，これから内積は可換であることが分かる．一方，外積については,$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})_i = \epsilon_{jki}A_jJ_k = \epsilon_{jki}(J_kA_j - i\hbar\epsilon_{kjl}A_l)$ だから，次のようになり

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} = -\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A} + 2i\hbar\boldsymbol{A}, \tag{8.33}$$

可換ではないことが分かる．またこれから次の関係が導かれる．

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J} = i\hbar\boldsymbol{J}. \tag{8.34}$$

これは (8.9) 式を意味する．

8.3 非可換，離散，量子

固有状態とはオペレータが確定値を持つことである．角運動量ではその確定値が半整数という特別な数字に限られることが結論されたのは，オペレータの交換関係に由来する．非可換オペレータでの変換がヒルベルト空間のベクトルから逸脱しないという条件が，j や m に，離散と半整数を結論づける．

この無次元化の量子として $J_0 = \hbar$ を導入するのが量子力学である．J_3 の間隔は $\hbar$ となる．

回転変換のように非可換なオペレータは随所に見ることができる．回転変換の例でみたように，非可換オペレータ J_i の間の関係式（交換関係など）は回転変換が第 9 章でみるような群を構成するという要請から導かれたものである．それと変換された状態ベクトルがヒルベルト空間に留まるという要請が離散値を導入するのである．そしてこの離散値の物理的値が $\hbar$ であることを発見したのが量子力学であると言える．

それに対して状態ベクトルの変換則は全て無次元のままであるから，その部分は，非可換性の法則のみで決まっていることであり，$\hbar$ の登場するオペレータの関係とは分離して考えることができる．

第 9 章
時空の対称性と状態ベクトル

物理学の対象は通常は時間空間（時空）の中に存在しており，そうした物理的対象の状態ベクトルによる記述を行うには時空に座標系を持ち込んで対象を計量可能にする必要がある．ところで，この計量化には無数の任意性があるので，同一の物理的状態を表すオペレータや状態ベクトルの表現にも無数の任意性がつきまとう．この単なる物差しの差による意味のない見かけ上の差異に惑わされずに，意味のある差異のみを表現する方法が望まれる．

9.1 相対性原理の対称性

9.1.1 変換群

解析力学のネーターの定理（3.4 節）では，座標系の変換に対する対称性が運動における運動量・エネルギー・角運動量・重心運動の保存則の根拠であることをみた．逆に言うと保存量が成立する系には対称性が背後にあるということである．時間空間の座標系の変換には，時間軸の並進変換，三次元空間の並進変換と回転変換，それに時間と空間の変換の混じった慣性系のガリレオ変換がある．最後の変換は慣性系の相対性原理を表しており，光速に近い速度ではガリレオ変換はローレンツ変換に変更される．

これら幾種類かの変換を組み合わせることで一般の変換が表現できる．ここではこの変換の合成が満たすべき条件について考える．それは，変換 $g_1(a)$ と $g_2(b)$ を続けて行う合成の変換 $g_2(b)g_1(a)$ は g_{1+2} という一つの変換で表せるという条件である．なぜなら，どの座標系も対等であるならば，一段目二段目という意味が絶対的であってはならないからである．

そういう視点に立てば前述のような変換の分類は便宜上のもので寧ろ変換のパラメータ全部を含む一般的な変換 $g(a,b,c,\cdots)$ を考えて，$g_1(a) = g(a,0,0,\cdots)$, $g_2(b) = g(0,b,0,\cdots)$, $\cdots$ のようにゼロでないパラメータの種類に応じて，並進変換とか回転変換とかの便宜上のネーミングがされてい

ると考えるべきなのである．そして，合成変換を

$$g(a_1, b_1, \cdots)g_2(a_2, b_2, \cdots) = g(A, B, \cdots) \tag{9.1}$$

と書けば，パラメータセット $a_1, b_1, \cdots$ と $a_2, b_2, \cdots$ から，合成変換のパラメータ $A, B, \cdots$ が決定されるパラメータの結合則が決められていなければならない．このような要請は変換の集合が群を構成すると表現される．合成された変換も群の対等な一員である．一例として，並進変換とガリレオ変換の合成変換を考えてみる．パラメータ (x, v) の変換を $g(x, v)$ と書けば，合成変換は順序に依存せず．

$$g(x_2, v_2)g(x_1, v_1) = g(x_1 + x_2, v_1 + v_2) \tag{9.2}$$

となることが分かる．こうした群の要素には恒等変換と逆変換が含まれることが知られている．

9.1.2 座標変換を表すユニタリー変換と斜線表現

$\hat{A}, \hat{B}$ の自己共役オペレータに対して

$$e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}} = \hat{B} + \lambda[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2}\lambda^2[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \cdots \tag{9.3}$$

という展開定理が一般にあるが，さらに $\hat{A}, \hat{B}$ が正準共役なオペレータであれば $[\hat{A}, \hat{B}]$ は c 数 $(\pm\hbar\hat{1})$ であるから，

$$e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}} = \hat{B} + \lambda[\hat{A}, \hat{B}] \tag{9.4}$$

となる．いま $U = e^{i\epsilon\hat{A}}$ と書けば，

$$U\hat{B}U^\dagger = e^{i\epsilon\hat{A}} \hat{B} e^{-i\epsilon\hat{A}} = \hat{B} + i\epsilon[\hat{A}, \hat{B}], \tag{9.5}$$

$\hat{A} \to -\hat{p}/\hbar,\ \hat{B} \to \hat{q}$ とすると，

$$U\hat{q}U^\dagger = \hat{q} - i\frac{\epsilon}{\hbar}[\hat{p}, \hat{q}] = \hat{q} - \epsilon \tag{9.6}$$

というシフト変換になる．すなわち $U = e^{-i\epsilon\hat{p}/\hbar}$ がデカルト座標系の原点を ϵ だけ移動させる座標変換のオペレータなのである．もちろん三つの軸方向に平行移動する三つの並進変換があるが，添字の付いた沢山の式を書くのは省略する．

次に座標変換のもう一つの例としてガリレオ変換を表すオペレータを考える．これは座標系の運動による速度，すなわち運動量，の変換を表すものだから，$\hat{p}$と$\hat{q}$ の役割を入れ替えたものである．そこで今度は，質量 μ を導入して $\hat{A} \to \mu\hat{q}/\hbar, \hat{B} \to \hat{p}$ として，$V = e^{i\mu\hat{q}/\hbar}$ と置くと，$\hat{p}$と$\hat{q}$ の交換関係を用いて，

$$V\hat{p}V^\dagger = \hat{p} + i\epsilon\frac{\mu}{\hbar}[\hat{q}, \hat{p}] = \hat{p} - \mu\epsilon \tag{9.7}$$

となるから，V は慣性系の速度を ϵ だけ換えるガリレオ変換のオペレータであることが分かる．

このように，U は空間座標の原点を x だけずらす並進 (boost) 変換のシフト変換のオペレータとして，V は速度 v の運動系へのガリレオ変換，速度のシフト変換のオペレータとして，次のように表される．

$$U = e^{-ix\hat{p}/\hbar}, \ V = e^{iv\mu\hat{q}/\hbar}. \tag{9.8}$$

簡単のため同一方向の変換のみを考える．前に述べたようにこれら二つを合成した変換は順序によらず同じであるべきだが，状態ベクトルの変換オペレータ $U(x)V(v)$ と $V(v)U(x)$ は同一ではない．

$$e^{i\mu v\hat{p}/\hbar}e^{-ix\hat{q}/\hbar} = e^{i(\mu v\hat{p}-x\hat{q})/\hbar}e^{\frac{1}{2}\mu vx[\hat{p},\hat{q}]/\hbar^2}, \tag{9.9}$$

$$e^{-ix\hat{q}/\hbar}e^{i\mu v\hat{p}/\hbar} = e^{i(\mu v\hat{p}-x\hat{q})/\hbar}e^{\frac{1}{2}\mu vx[\hat{q},\hat{p}]/\hbar^2} \tag{9.10}$$

であるから，

$$V(v)U(x) = e^{i\mu xv/\hbar}U(x)V(v) \tag{9.11}$$

となり余分な位相があらわれる．

二つのパラメータ (x,v) を含むユニタリー変換を $W(x,v)$ と書けば，変換群を構成するには次の変換則を満たさねばならない．

$$W(x_2,v_2)W(x_1,v_1)\hat{S}W^{\dagger}(x_1,v_1)W^{\dagger}(x_2,v_2)$$

$$= W(x_1+x_2,v_1+v_2)\hat{S}W^{\dagger}(x_1+x_2,v_1+v_2). \tag{9.12}$$

この要請は，W について双一次なので、$|g| = 1$ である位相因子を用いて $W(x_2,v_2)W(x_1,v_1) = gW(x_1+x_2,v_1+v_2)$ であればよいことになる．そこで $W(x,v) = e^{i\mu xv/(2\hbar)}U(x)V(v) = e^{-i\mu xv/(2\hbar)}V(v)U(x)$ と置けば，W の合成では $g = e^{-i\mu(x_1v_2-x_2v_1)/(2\hbar)}$ となることが分かる．

状態ベクトルを $|\psi\rangle$ と書くと，変換の合成は

$$W(x_2,v_2)W(x_1,v_1)|\psi\rangle = W(x_1+x_2,v_1+v_2)(g|\psi\rangle) \tag{9.13}$$

と書ける．従って，変換 W が $W(x_2,v_2)W(x_1,v_1) = W(x_1+x_2,v_1+v_2)$ と群を構成するという要件は，$|\psi\rangle$ と $g|\psi\rangle$ が同一の状態を表すことである．(7.4) 節の Wigner の定理の議論で遷移確率が比例する $|\langle\psi|\phi\rangle|^2$ の同一性が判断基準であることを述べたが，この議論に従えば定数の位相だけ異なる状態ベクトルは同一状態である．このように状態ベクトルには定数位相分の不定性があり，その不定性を同一視した意味では状態のベクトルという言葉の代わりに斜線 (ray) と呼ぶこともある．したがって，群を構成する W は状態の斜線を不変に保つ，といえる．

9.1.3 時空対称性と変換オペレータ

ここで時空対称性とは 1+3 次元の時間空間の一様等方性と慣性系の同等性（相対性原理）のことを指している．整理すると

1　空間の並進変換に対する対称性

2　時間の並進変換に対する対称性

3　三次元空間の回転変換に対する対称性

4　慣性系変換に対する対称性

である．解析力学で見たように，各々の変換の生成子が p_i, H, J_i, K_i である．

4 については

4a　ガリレオ変換

4b　ローレンツ変換

の場合があった．

大事なことは，変換作用による時空という存在の同一性（すなわち対称性）によって対象記述の様式が保持されていることである．受動変換と能動変換が時空という物理的存在の対称性によって区別が鮮明でなくなるのでこのことは見落とされがちである．受動変換による表現の任意性は逆にこの任意性を越えた法則性のあり方を指示しているのである．また変換という幾何的操作を司るオペレータが何れも物理量 (p_i, H, J_i, K_i) によって構成される．このことは，物理量に対する素朴な観念，すなわち，物理量とは時空に登場する物的対象が保持しているものだという観念をぐらつかせるものである．何故なら変換と対称性を語るには物的存在は必要としないからである．

以下で取り上げる三番目の回転変換とは三次元空間の長さ $(\sum_{i=1}^{3} x_i^2)$ を不変に保つ変換である．一方，4b のローレンツ変換も四次元時空での “長さ”$(x_0^2 - \sum_{i=1}^{3} x_i^2)$ を不変に保つ変換であるから，“長さ” の定義は異なるが，一種の “回転変換” と見なすこともできる．これら 3 と 4b の密接な関連をみてみる．

9.2 ローレンツ変換とスピノール

9.2.1 パウリ行列とローレンツ変換

三つのパウリ行列 σ_i に単位行列 $\sigma_0 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ を加えた四つ組のパウリ行列はミンコフスキー空間のローレンツ変換対称群と結びついている．いまこの空間の座標の組 (ct, x, y, z) から次のような行列 X を考える．

$$X = \sigma_0 ct + \sigma_1 x + \sigma_2 y + \sigma_3 z = \begin{pmatrix} ct + z & x - iy \\ x + iy & ct - z \end{pmatrix}. \tag{9.14}$$

この X の行列式は

$$\det|X| = (ct)^2 - (x^2 + y^2 + z^2) \tag{9.15}$$

である．従って，(ct, x, y, z) からローレンツ変換された (ct', x', y', z') で構成された X' は $\det|X'| = \det|X|$ の関係を満たす．ローレンツ変換の対称性とはこの行列式の不変性のことと読み替えることができる．同様に三次元空間での回転変換 $(ct, x, y, z) \to (ct, x', y', z')$ でも $(x^2+y^2+z^2) = (x'^2+y'^2+z'^2)$ だから，$\det|X'| = \det|X|$ の関係を満たす．

一方 $\det|U| = 1$ なるユニタリー行列 U による X の変換された $X' = UXU^\dagger$ についても $\det|X'| = \det|UXU^\dagger| = \det|U|\det|X|\det|U^\dagger| = \det|X|$ である．すなわち，ローレンツ変換や回転変換といった時間空間座標の変換はこのようなユニタリー行列 U で表現できるのである．一般論は他書にゆずり，幾つかの具体例をあげて納得しておくことに止める．

例えば，

$$U = \begin{pmatrix} 1/\lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \qquad \det|U| = 1 \tag{9.16}$$

なる行列での変換を考えると

$$X' = \begin{pmatrix} 1/\lambda^2(ct+z) & x-iy \\ x+iy & \lambda^2(ct-z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct'+z' & x'-iy' \\ x'+iy' & ct'-z' \end{pmatrix}. \tag{9.17}$$

これから，

$$\begin{aligned} ct' &= (\lambda^{-2}+\lambda^2)ct + (\lambda^{-2}-\lambda^2)z, \\ x' &= x, y' = y, z' = (\lambda^{-2}-\lambda^2)ct + (\lambda^{-2}+\lambda^2)z. \end{aligned} \tag{9.18}$$

ここで λ を次のようにとれば

$$\lambda = \left(\frac{1-\beta}{1+\beta}\right)^{1/4}, \tag{9.19}$$

$$ct' = \frac{ct-\beta z}{\sqrt{1-\beta^2}},\ x' = x,\ y' = y,\ z' = \frac{z-\beta ct}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{9.20}$$

となり，これは $\beta = V/c$ のローレンツ変換の式であることが分かる．

また回転変換も $U = R_2(\phi)$ を用いると X の変換 $X' == UXU^\dagger$ は次のようになる．

$$\begin{aligned} X' &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} & -\sin\frac{\phi}{2} \\ \sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct+z & x-iy \\ x+iy & ct-z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} & \sin\frac{\phi}{2} \\ -\sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} ct+\cos\phi z-\sin\phi x & \cos\phi x+\sin\phi z-iy \\ \cos\phi x+\sin\phi z+iy & ct-\cos\phi z+\sin\phi x \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{9.21}$$

これから $U = R_2(\phi)$ は y 軸周りの回転変換

$$t' = t, \quad x' = \cos\phi x + \sin\phi z, \quad y' = y, \quad z' = -\sin\phi x + \cos\phi z \quad (9.22)$$

を表すことが確かめられる．

9.2.2 スピノール

四次元時空でのローレンツ変換や三次元空間の回転変換が二次元ヒルベルト空間での "回転" 変換を表すユニタリー行列 U で表現できることをみた．この筋書きでは変換という操作の表現の仕方にのみ注意が集中して "変換を受ける量" には目がいっていない．四次元時空の変換では変換されるものは座標だけでなく，運動量や電磁場といった四元ベクトルやテンソルである．余りにも色々なものがあるために一々言及しなかった面がある．それに比べて，U で変換を受ける二次元ヒルベルト空間の存在に触れていないが，これがスピノールというものである．

$A = 1, 2$ として 2 成分スピノールを ξ^A とすると，$\det|A| = 1$ の行列 A^C_D で $\xi'^A = A^A_B \xi^B$ と変換される．この空間での計量テンソルを ϵ_{AB} とすれば，この変換で大きさが変化しないという条件は

$$\epsilon_{AB}\xi'^A\xi'^B = \epsilon_{AB}A^A_C A^B_D \xi^C\xi^D = \epsilon_{CD}\xi^C\xi^D. \quad (9.23)$$

上式の右辺は

$$\epsilon_{AB} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (9.24)$$

であれば $\epsilon_{CD}\det|A|\xi^C\xi^D$ となり，大きさが不変となる．

9.2.3 ディラック方程式

ローレンツ変換は座標の変換だけでなく (E, cp_x, cp_y, cp_z) というエネルギー・運動量ベクトルに対しても成り立つ．だから X と同様に

$$Y = \sigma_0 E + \sigma_1 cp_x + \sigma_2 cp_y + \sigma_3 cp_z = \begin{pmatrix} E + cp_z & cp_x - icp_y \\ cp_x + icp_y & E - cp_z \end{pmatrix} \quad (9.25)$$

なる行列を考えれば

$$\det|Y| = E^2 - c^2(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = Y^2 \quad (9.26)$$

は不変量である．これを質量 m と置けば

$$Y^2 = E^2 - c^2(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = (mc^2)^2 \quad (9.27)$$

$$\text{あるいは}\quad Y = \sigma_0 E + \sigma_1 cp_x + \sigma_2 cp_y + \sigma_3 cp_z = \pm mc^2. \tag{9.28}$$

ここで唐突だが自由場 ψ に対する次のディラック方程式を見てみる.

$$i\gamma^0 \frac{\partial\psi}{c\partial t} + i\gamma^j \frac{\partial\psi}{\partial x^j} - \bar{m}\psi = 0. \tag{9.29}$$

ここで

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \tag{9.30}$$

は四元パウリ行列で与えられる.

これは (9.28) 式で $E \to (\hbar/i)\partial/\partial t$, $p_x \to (\hbar/i)\partial/\partial x, \cdots$ の置き換えをすると，二種類の 2 成分スピノール ψ に対する拘束条件 $(Y \pm mc^2)\psi = 0$ として導かれる.

この方程式には本書でこれ以上は触れないが，歴史的役割をまとめておく.

1. スピン：前期量子論の原子論の中で現象論的に導入された電子のスピン，「パウリの排他律」，量子統計の法則性はこのディラックの相対論的電子論によって基礎付けられた．時空間の方向を成分とするベクトルやテンソルとは異なる変換性を持つスピノールという数学的存在はローレンツ変換の群論的表現に由来するといえる.
2. 反粒子：ディラック方程式の場が 4 成分なのは二つの自由度を持つ粒子・反粒子の合計四つの状態があることを意味する．すなわち，電子は，正・反の二状態，スピン上・下の二状態の組み合わせとして「正，上」,「正，下」,「反，上」,「反，下」の何れかにあるのである．電子だけでなくクォークとレプトンの場がディラック方程式で記述される.
3. 相対論的粒子のシュレディンガー方程式：この ψ は電磁場などと相互作用する場であって，状態ベクトルではない．しかしこの場の運動方程式は時間に対して 1 階微分であり，シュレディンガー方程式と類似しているため，シュレディンガー方程式の相対論版と見なされることがある.

   一般に相対論的粒子のシュレディンガー方程式を作る構想には次の難問が潜んでいる．例えば，粒子二体系のシュレディンガー方程式の空間座標は 6 個になるが，ローレンツ対称性を維持するには時間座標も 2 個導入する必要に迫られる．すなわち，粒子多体系の相対論的シュレディンガー方程式は多時間理論でなければならない．この多体系の極限として場を位置づける見方では各点に別々の時間を設定する超多時間理論となる．かつて朝永振一郎はシュレディンガー方程式の時間を空間座標の関数 $\sigma(x,y,z)$ で置き換えた

   $$i\hbar \frac{\delta\Psi}{\delta\sigma(x,y,z)} = H\Psi$$

   という形式を提案したことがある．しかしハミルトニアンを基礎とする正

準量子化の手法は時間を特別視しており相対論的対称性の重視とは矛盾するものである．こうした背景もあり素粒子場の量子論では場のラグランジアン形式を基本にしている．これらの状況が示唆していることは，シュレディンガー方程式の時間は四次元時空の時間とは異質なものであることである．さらに，ユニタリー変換の一例として時間変化があることを考えれば量子力学にとって時間は中核にない．その意味では熱力学の法則が変数の変化分の関係を与えるものであって時間を陽に表示する必要がないような法則であることとの類似性を示唆している．推論や期待値には時間や状態ベクトルは表面から後退する．シュレディンガー方程式のイメージが量子力学の本質を隠蔽していないのかという懐疑もうまれる．

9.2.4 時空変換オペレータの交換関係

角運動量のオペレータの交換関係が量子力学の新側面を次々と見せてくれる．したがって，角運動量と同類の時空の変換を司どるオペレータ全体（9.1.3 節）の間の交換関係にも関心がいく．それらを書き下すと次のようになる．

$$[p_0, p_m] = [p_m, p_n] = 0, [p_0, J_n] = 0, [p_m, J_n] = i\epsilon_{mn\ell}\hbar p_\ell,$$

$$[p_m, K_n] = i\delta_{mn}\hbar p_0, [p_0, K_n] = i\hbar p_n, [J_m, J_n] = i\epsilon_{mn\ell}\hbar J_\ell,$$

$$[K_m, J_n] = i\epsilon_{mn\ell}\hbar K_\ell, [K_m, K_n] = -i\epsilon_{mn\ell}\hbar J_\ell. \tag{9.31}$$

交換関係を施す変換の順序の差と見なすと，これらの関係からいろいろのことが読み取れる．例えば最後の関係は二つのローレンツ変換の順序の差が回転変換を伴うことを示している．この回転は Wigner 回転と呼ばれている．

第 10 章
スピンとパウリ行列

$\hbar$ を単位に測って角運動量が 1/2 のスピンの二状態の表示法，傾いた測定，ブロッホ球，二体スピン系，エンタングルした状態など，二次元ヒルベルト空間の数理的ツールについて習熟する．

10.1 スピン

10.1.1 j=1/2 の場合

これが j が 0 でない最小の角運動量を持つ場合である．これは軌道角運動量ではないが，自然界には $\hbar/2$ の角運動量を持つ素粒子が存在する.「軌道」でないのでスピンと呼ばれて「自転」としてイメージされることもあるが，そうした三次元空間中の運動に還元できないものである．このスピンは二状態の状態ベクトルを扱う数理的なツールとして，素粒子のスピンを離れても，便利なものである．本章では以下にそうした数理ツールをみておく．$\hbar = 1$ で記す.

この状態ベクトルが満たすべき関係をまとめると

$$J^2|1/2, \pm 1/2\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)|1/2, \pm 1/2\rangle, \tag{10.1}$$

$$J_3|1/2, \pm 1/2\rangle = \pm\frac{1}{2}|1/2, \pm 1/2\rangle. \tag{10.2}$$

まず $|j, m\rangle$ を行列表示では次のように書くと，

$$|1/2, 1/2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1/2, -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{10.3}$$

オペレータは

$$J_3 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}, \quad J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{10.4}$$

パウリ行列 σ_i を用いて $J_i = (1/2)\sigma_i$ だから，三次元空間の i 軸周りの回転に

伴うヒルベルト空間での二次元状態ベクトルの変換を与えるユニタリー変換は $U_i(\phi)=e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_i}$ で与えられる．$\sigma_i^2=1$ を使って，対数のテイラー展開をすれば

$$U_i(\phi)=e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_i}=\sum_0^{\infty}\left(-i\frac{\phi}{2}\sigma_i\right)^n=I\cos\frac{\phi}{2}-i\sigma_i\sin\frac{\phi}{2} \tag{10.5}$$

となることが示せる．例えば

$$U_2(\phi)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\phi}{2} & -\sin\frac{\phi}{2}\\ \sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2}\end{pmatrix},\quad U_3(\phi)=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\phi}{2}} & 0\\ 0 & e^{i\frac{\phi}{2}}\end{pmatrix}. \tag{10.6}$$

またオイラー角で表した一般の変換に対しては

$$D(\alpha,\beta,\gamma)=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\alpha}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\gamma}{2}} & -e^{-i\frac{\alpha}{2}}\sin\frac{\psi}{2}e^{i\frac{\gamma}{2}}\\ e^{i\frac{\alpha}{2}}\sin\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\gamma}{2}} & e^{i\frac{\alpha}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{i\frac{\gamma}{2}}\end{pmatrix}. \tag{10.7}$$

10.1.2　二次元行列の固有値方程式

ここに二次元行列の固有値と固有ベクトルを求める計算をまとめておく．連立方程式 $\alpha x+\beta y=a$, $\gamma x+\delta y=b$ の解法は，まずこれを行列表式で書き

$$\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}. \tag{10.8}$$

行列表式での根の公式は

$$x=\frac{\det\begin{vmatrix}a & \beta\\ b & \delta\end{vmatrix}}{\det\begin{vmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{vmatrix}},\quad y=\frac{\det\begin{vmatrix}\alpha & a\\ \gamma & b\end{vmatrix}}{\det\begin{vmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{vmatrix}} \tag{10.9}$$

である．次に固有値を λ として，$\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}$，から $\begin{pmatrix}\alpha-\lambda & \beta\\ \gamma & \delta-\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=0$ であるが，前の根の公式で $a=b=0$ だから，分子はゼロ．ゼロベクトルでない解が存在するための必要条件は分母の行列式もゼロになることであり，これから固有値方程式は

$$\det\begin{vmatrix}\alpha-\lambda & \beta\\ \gamma & \delta-\lambda\end{vmatrix}=0 \tag{10.10}$$

である．σ_xとσ_y の固有値を求めると，各々

$$\det\begin{vmatrix}0-\lambda & 1\\ 1 & 0-\lambda\end{vmatrix}=0 \text{ から } \lambda=\pm1,$$

$$\det\begin{vmatrix}0-\lambda & -i\\ i & 0-\lambda\end{vmatrix}=0 \text{ から } \lambda=\pm1.$$

σ_x の固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 1 \times \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},\ したがって\ \beta = \alpha,$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -1 \times \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},\ したがって\ \beta = -\alpha.$$

$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ であり，状態ベクトルの全体の位相は物理的に意味がないから $\alpha = 1/\sqrt{2}$ ととり，

$$|0\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_z + |1\rangle_z), \tag{10.11}$$

$$|1\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_z - |1\rangle_z). \tag{10.12}$$

また，確かに $\sigma_x|0\rangle_x = 1 \times |0\rangle_x$，$\sigma_x|1\rangle_x = -1 \times |1\rangle_x$ である．

σ_y の固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 1 \times \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},\ から\ \beta = i\alpha,$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -1 \times \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},\ から\ \beta = -i\alpha.$$

$$|0\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_z + i|1\rangle_z), \tag{10.13}$$

$$|1\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_z - i|1\rangle_z). \tag{10.14}$$

また確かに $\sigma_y|0\rangle_y = 1 \times |0\rangle_y$，$\sigma_y|1\rangle_y = -1 \times |1\rangle_y$.

σ_z の固有ベクトルを介さないで，σ_x と σ_y の固有ベクトルの関係を書くと，

$$|0\rangle_x = \frac{1-i}{2}|0\rangle_y + \frac{1+i}{2}|1\rangle_y, \tag{10.15}$$

$$|1\rangle_x = \frac{1+i}{2}|0\rangle_y + \frac{1-i}{2}|1\rangle_y. \tag{10.16}$$

10.2 傾いたスピン

10.2.1 スピンを斜めに測る

パウリ行列はスピンの二状態を z 軸方向の上下の向き (up-down) で表現している．電子のスピンは磁気能率を持ち，小磁石とイメージしてよい．そして，電場との作用で電荷の正負が分別できるように，磁場との作用によって小磁石の向きが分別できる．ただし三次元実空間でのその方向は任意の方向である．このために，この小磁石の N 極-S 極の向きの意味での「上下」という言い方と，

三次元実空間での小磁石の方向の表現とに混同が生じやすい．このことに注意しながら，z 軸を基準にした「上下」状態指定を一般の方向に拡張する．

いま二状態を指定する方向を，y 軸の周りに θ だけ傾けてみる．z 軸は xz 面に沿って回転変換を受ける．このためには，

$$U_y(\theta) = I\cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_y \sin\frac{\theta}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\phi}{2} \\ \sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \tag{10.17}$$

による変換を行えばよい．計算の結果は次のようになる．

$$|0(\theta)\rangle = U_y(\theta)|0\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|1\rangle, \tag{10.18}$$

$$|1(\theta)\rangle = U_y(\theta)|1\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|1\rangle. \tag{10.19}$$

状態ベクトルのこの変換の意味を考察してみる．傾いた状態 $|0(\theta)\rangle$ にあるスピンの z 軸方向での「上下向き」を決める測定を行うとする．スピンの側から見れば，斜めに測られたことを意味する．各々の確率は次のように計算される．

$$\text{「上向き」}:\ \langle 0(\theta)|\Pi_0|0(\theta)\rangle = \langle 0(\theta)|(|0\rangle\langle 0|)|0(\theta)\rangle$$
$$= |\langle 0|0(\theta)\rangle|^2 = P(0,0(\theta)), \tag{10.20}$$

$$\text{「下向き」}:\ \langle 0(\theta)|\Pi_1|0(\theta)\rangle = \langle 0(\theta)|(|1\rangle\langle 1|)|0(\theta)\rangle$$
$$= |\langle 1|0(\theta)\rangle|^2 = P(1,0(\theta)). \tag{10.21}$$

また，傾いた状態 $|1(\theta)\rangle$ にあるスピンの同様の測定を行った場合の確率 $P(0,1(\theta)) = |\langle 0|1(\theta)\rangle|^2$，$P(1,1(\theta)) = |\langle 1|1(\theta)\rangle|^2$ も計算でき，これらは次のようになる．

$$P(0,0(\theta)) = \cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{1+\cos\theta}{2},\quad P(1,0(\theta)) = \sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1-\cos\theta}{2}, \tag{10.22}$$

$$P(0,1(\theta)) = \sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1-\cos\theta}{2},\quad P(1,1(\theta)) = \cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{1+\cos\theta}{2}. \tag{10.23}$$

確かに $P(0,0(\theta)) + P(1,0(\theta)) = 1$，$P(0,1(\theta)) + P(1,1(\theta)) = 1$ だから，$|0(\theta)\rangle$ のスピンも $|1(\theta)\rangle$ のスピンも z 軸に沿って置かれた測定器の「上下」何れかの応答を必ず出すことが分かる．$\theta = 0$ なら $P(0,0(\theta)) = P(1,1(\theta)) = 1$，$P(1,0(\theta)) = P(0,1(\theta)) = 0$ となるのは当然だが，$\theta = \pi$ では逆に $P(0,0(\theta)) = P(1,1(\theta)) = 0$，$P(1,0(\theta)) = P(0,1(\theta)) = 1$ となる．状態ベクトルを見ると $|0(\pi)\rangle = |1\rangle$，$|1(\pi)\rangle = -|0\rangle$ であり，ベクトルの位相も変化しているが，このために $J_z|0(\pi)\rangle = -1/2|0(\pi)\rangle$，$J_z|1(\pi)\rangle = 1/2|1(\pi)\rangle$ と正しい固有値を与えている．

10.2.2 物理量は相互の角度にのみ依存

今度は，測定器を傾けて z 軸方向で上下を向いた状態にあるスピンを測定する状況を考える．オペレータ σ_z と σ_x の変換は次のようになる．$\sigma_z(\theta) = U_y\sigma_z U_y^\dagger = (\cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_y \sin\frac{\theta}{2})\sigma_z(\cos\frac{\theta}{2} + i\sigma_y^\dagger \sin\frac{\theta}{2}) = \cos\theta\sigma_z + \sin\theta\sigma_x$，また同様に $\sigma_x(\theta) = U_y\sigma_x U_y^\dagger = -\sin\theta\sigma_z + \cos\theta\sigma_x$.

これより，角運動量 $J_z = (1/2)\sigma_z$ の期待値は $\langle 0|J_z(\theta)|0\rangle = (1/2)\langle 0|\sigma_z(\theta)|0\rangle$ $= (\hbar/2)\cos\theta$ となることがすぐ分かるが，これを次のように上に求めた確率と関連させて計算することもできる．$\sigma_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$ であることに着目して

$$\langle 0|\sigma_z(\theta)|0\rangle = (\langle 0|U_y)(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|)(U_y^\dagger|0\rangle)$$

$$= P(0, 0(\theta)) - P(1, 0(\theta)) = \cos\theta \tag{10.24}$$

である．すなわち $J_z(\theta)$ の期待値とは，$\cos^2\theta/2$ の確率で $1/2$, $\sin^2\theta/2$ の確率で $-1/2$，の平均値なのである．

これまでは，状態か測定器の何れか一方を z 軸方向にとったが，何れの方向も z 軸から傾いている一般的な状況を考えて，確率を求めることもできる．例えば，測定器は角度 β 傾けて，スピンが α だけ傾いた状態なら，確率は

$$\langle 0(\alpha)|\Pi_\beta|0(\alpha)\rangle = \langle 0|U_y^\dagger(\alpha)|0(\beta)\rangle\langle 0(\beta)|)U_y(\alpha)|0\rangle$$

$$= \langle 0|W^\dagger(|0\rangle\langle 0|)W|0\rangle,\ ここで\ W = U_y^\dagger(\beta)U_y(\alpha). \tag{10.25}$$

そして W を計算すると

$$U_y^\dagger(\beta)U_y(\alpha) = e^{i\beta\sigma_y/2}e^{-i\alpha\sigma_y} = e^{-i(\alpha-\beta)\sigma_y/2} = U_y(\alpha-\beta) \tag{10.26}$$

である．すなわち確率は相対角度 $(\alpha-\beta)$ にのみ依存していることになる．z 軸の方向には物理的に固有の意味がないのであるから，物理的に意味のある確率がその方向からの角度に依存してないという結論は当然とも言える．

いま，0 または 1 の状態を指定する記号を a, b と書くと，前に求めた確率は $\langle a(\alpha)|(|b(\beta)\rangle\langle b(\beta|)|a(\alpha)\rangle = |\langle b(\beta)|a(\alpha)\rangle|^2 = P(b(\beta), a(\alpha))$ であり，ここで

$$P(0(\beta), 0(\alpha)) = P(1(\beta), 1(\alpha)) = \cos^2\frac{(\alpha-\beta)}{2}, \tag{10.27}$$

$$P(1(\beta), 0(\alpha)) = P(0(\beta), 1(\alpha)) = \sin^2\frac{(\alpha-\beta)}{2}. \tag{10.28}$$

10.3 Q-ビット状態の表示法

10.3.1 ブロッホ球

文字，映像，音声などいかなる情報もバイナリー (binary) のデジタル (digital) 情報であるビット (bit) の繋がり (string) で表現できることが現代の情報技術の基礎にある．スピンの状態 $|0\rangle, |1\rangle$ もこのビット状態にあたるが，量子力

学での一般状態は $|\phi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ で与えられる．すなわち重なったビット状態であり，これは Q-ビット状態と呼ばれている．

Q-ビットの指定には四つの実数が必要のようだが，規格化条件 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ と全体の位相が意味を持たないことから，実質，二個の実数の自由度があるのみである．そしてこの二個の実数としては次のように θ, ϕ の二つの角度を採用することができる．この二つの角度は，各々，球面上の位置を表す緯度と経度に相当する．北極を $|0\rangle$, 南極を $|1\rangle$ に対応させることができる．このような状態の表示はブロッホ (Bloch) 球と呼ばれている．

これまでは「傾ける」操作を z 軸まわりで考えたが，状態の上下を指定する任意の方向への変換は，この変換と z 軸まわりの変換を組み合わせると得られる．z 軸まわりに ϕ だけ回転させる変換は

$$U_z(\phi) = I\cos\frac{\phi}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\phi}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} - i\sin\frac{\phi}{2} & 0 \\ 0 & \cos\frac{\phi}{2} + i\sin\frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$$

だから

$$U_z(\phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}. \tag{10.29}$$

したがって，$U_y(\theta)$ と $U_z(\phi)$ の回転を続いて行えば，変換行列は

$$U_z(\phi)U_y(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} & -e^{-i\frac{\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} & e^{i\frac{\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{10.30}$$

となり，これによる状態ベクトルへの変換は次のようになる．

$$\begin{aligned} U_y(\theta)U_z(\phi)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= e^{-i\frac{\phi}{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle\right). \end{aligned} \tag{10.31}$$

$$\begin{aligned} U_y(\theta)U_z(\phi)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= e^{-i\frac{\phi}{2}}\left(-\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}|1\rangle\right). \end{aligned} \tag{10.32}$$

10.3.2 光の偏光状態　ポアンカレ球

光は振動する電場と磁場からなる電磁波であり，ベクトルである電場と磁場の方向は互いに直交し，光の進行方向に垂直な面に沿ってある．いま，横に進む光を想定して，進行方向を z 軸にとれば，電場と磁場はそれに垂直な面内（水平方向を x 軸，鉛直方向を y 軸）にある．振動数と振幅の決まった電磁波の物理状態はこの面内での電場ベクトル $\boldsymbol{E}(E_x, E_y)$ の方向により指定される．

もし E_x, E_y が互いに同位相で振動して，その比が時間的空間的に変化しないなら，電場ベクトルは

$$\boldsymbol{E}(x,t) = A(\cos\theta \boldsymbol{e}_x + \sin\theta \boldsymbol{e}_y)e^{i(\omega t-kz)} \tag{10.33}$$

の実数部分で与えられる．ここで，θ は x 軸からの角度である．このような状態は線形偏光の状態と呼ばれる．いま基底ベクトル $\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$ を $|0\rangle$, $|1\rangle$ に対応して $|H\rangle$, $|V\rangle$ と書けば，線形偏りの状態は $\cos\theta|H\rangle + \sin\theta|V\rangle$ で与えられる．$|H\rangle$ は横 (horizontal) 状態，$|V\rangle$ は縦 (vertical) 状態，また $\theta = \pi/4$ の $(|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$ は対角上 (diagonal up) 状態，$\theta = -\pi/4$ の $(|H\rangle - |V\rangle)/\sqrt{2}$ は対角下 (diagonal down) 状態と呼ばれる．このような表示法は厳密には量子力学の表示法とは区別されるべきものであり，光学の分野でジョーンズ・ベクトルとも呼ばれているものである．

これに対して，同位相でなければ，電場ベクトルの方向は xy 面内で回転する．例えば，

$$\boldsymbol{E}(x,t) = A(e^{i(\omega t-kz)}\boldsymbol{e}_x + e^{i(\omega t-kz\pm\pi/2)}\boldsymbol{e}_y) \tag{10.34}$$

のように位相が異なっておれば，実数部分は $\cos(\omega t-kz)\boldsymbol{e}_x \pm \sin(\omega t-kz)\boldsymbol{e}_y$ となり，大きさ一定のベクトルが回転することを表す．+ 符号なら左向き円偏光 (left circular)，− 符号なら右向き円偏光 (right circular) と呼ばれる．$e^{\pm\pi/2} = \pm i$ だから，上の式は

$$\boldsymbol{E}(x,t) = A(\boldsymbol{e}_x \pm i\boldsymbol{e}_y)e^{i(\omega t-kz)} \tag{10.35}$$

と書ける．したがって，ベクトルの成分を複素数に拡張する立場からすると，左向き円偏光状態を $(|0\rangle + i|1\rangle)/\sqrt{2}$，右回り円偏光状態を $(|0\rangle - i|1\rangle)/\sqrt{2}$ と書き表す．

量子力学の場合と同様に，光の偏光状態を表すジョーンズ・ベクトルも全体の位相は意味を持たない．したがって，ブロッホ球の場合の議論同様，一般の状態は $\cos\theta|H\rangle + e^{i\phi}\sin\theta|V\rangle$ のように二つの角度で指定できる．また，ブロッホ球のように，球の中心に対して反対方向にある状態同士は直交するという表現もできる．このような表示をポアンカレ球という．しかし，ブロッホ球の場合と違って，θ, ϕ が “球” の緯度，経度に対応したり，三次元実空間の方向に対応したりはしていないことに注意する必要がある．

10.4 二体スピン系の角運動量

10.4.1 シングレット状態とトリプレット状態

角運動量演算子の固有値の考察から，$|J_z|$ の最大値が j ならば，大きさは $J^2 = j(j+1)$ の状態にあり，j は $0, 1/2, 1, 3/2, \cdots$ と半整数に限られる規則

があることをみた．そして，同じ j で，J_z の異なる状態の数は $2j+1$ 個ある．いまは $j=1/2$ の粒子を考えているので，1粒子のスピン状態は $|0\rangle$ と $|1\rangle$ で表される．

次にこのような粒子の二体系を考える．例えば，第一粒子の状態が $|0\rangle$ で第二粒子の状態が $|1\rangle$ である2粒子複合系の状態ベクトルは $|0\rangle_1|1\rangle_2$ のように一体状態の積状態によって書き表す．一方，この複合系の角運動量演算は

$$J^2 = (\boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2)^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2,\ J_z = J_{z1} + J_{z2}. \tag{10.36}$$

J^2 を $|0\rangle|1\rangle$ に作用させてみる．$\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2 = (1/4)(\sigma_{x1}\sigma_{x2} + \sigma_{y1}\sigma_{y2} + \sigma_{z1}\sigma_{z2})$，また $\sigma_x|0\rangle = |1\rangle$，$\sigma_x|1\rangle = |0\rangle$，$\sigma_y|0\rangle = i|1\rangle$，$\sigma_y|1\rangle = -i|0\rangle$ などの関係を用いて計算すると

$$J^2|0\rangle|1\rangle = 2\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) + \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)\right)|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle \tag{10.37}$$

となり，$|0\rangle|1\rangle$ は J^2 の固有状態ではないことが分かる．しかし，$A(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle)$ や $A(|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle)$ のようなベクトルは固有状態を表すことに気づく．

角運動量演算子の固有値に対する規則は，一体系か複合系かに拘らず，成立するものである．その視点からみれば，二体系では $|J_z|$ の最大値が $j=0$ と $j=1$ の次のように二つの J^2 の固有状態に分類される．

シングレット (singlet) 状態

$|\psi_s\rangle = |j=0, m=0\rangle$，$J^2|\psi_s\rangle = 0|\psi_s\rangle = 0$.

$$|j=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle). \tag{10.38}$$

トリプレット (triplet) 状態

$|\psi_t\rangle = |j=1, m=-1,0,1\rangle$，$J^2|\psi_t\rangle = 1(1+1)|\psi_t\rangle = 2|\psi_t\rangle$.

$$|j=1, m=1\rangle = |0\rangle|0\rangle,\ |j=1, m=-1\rangle = |1\rangle|1\rangle,$$

$$|j=1, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle). \tag{10.39}$$

10.4.2 エンタングルメント：ベル状態

二体系のスピン状態は $|0\rangle|0\rangle$，$|0\rangle|1\rangle$，$|1\rangle|0\rangle$，$|1\rangle|1\rangle$ のような積状態で表せるが，これらは必ずしも角運動量の固有状態ではなかった．一方，角運動量の固有状態に着目すると，$|j=1, m=1\rangle = |0\rangle|0\rangle$ や $|j=1, m=-1\rangle = |0\rangle|0\rangle$ のように第一粒子と第二粒子の状態の積に因数分解できる場合と，$|j=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle)$，$|j=1, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle)$ のように積には因数分解できない場合がある．

二体の状態の積でない状態はエンタングルした状態と呼ばれる (entangled, 量子もつれ)．エンタングルした状態の意味は $|0\rangle|1\rangle$ (第一粒子が $|0\rangle$ で第二粒

子が $|1\rangle$ にある状態）と $|1\rangle|0\rangle$（第一粒子が $|1\rangle$ で第二粒子が $|0\rangle$ にある状態）の重なった状態の意味である．一般のエンタングルした状態は，$|\alpha|^2+|\beta|^2=1$ として，$\Psi=\alpha|0\rangle|1\rangle+\beta|1\rangle|0\rangle$ のように書ける．

こうした中で次のような互いに直交するように定義された状態はベル (Bell) 状態と呼ばれる．

$$\Psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle+|1\rangle|1\rangle),\quad \Psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle-|1\rangle|1\rangle),$$

$$\Psi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|0\rangle+|0\rangle|1\rangle),\quad \Psi_4=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle-|1\rangle|0\rangle).$$

Ψ_4 はシングレット状態，Ψ_3 は $|j=1,m=0\rangle$ だが，他の二つは角運動量の固有状態とは一致していない．

コラム 8　アインシュタイン「隠れた変数」の行方

いまは誰も口にしないが「隠れた変数 (hidden parameter)」は永く学界公認の研究テーマであった．このことは「岩波理化学辞典」,「物理学事典（培風館）」などで大項目の学術用語で載っていることから分かる．アインシュタインの量子力学への不満を解消する試みだが，フォン・ノイマンは早々に,「隠れた変数」の不可能性 (no-go-theorem) を宣言したが，ヒルベルト空間の作用素論に基づく証明はしばらくくすぶった．

「隠れた変数」の展開を，他の流れと合わせて，下の年表にした．直接の関係でない項目は […] で括った．Gleason の定理と Kochen–Specker の定理はペレス「量子論の概念と手法」（丸善出版）大場一郎，山中由也，中里弘通訳，アイシャム「量子論」（吉岡書店）佐藤文隆，森川雅博訳を参照，ベル不等式は 14.3 節で触れるが，拙著「アインシュタインの反乱と量子コンピュータ」（京大学術出版会）も参照．

—年　表—

- 数理的にみた進展 [1924 年クーラント–ヒルベルト著「数理物理学の方法」, 1925 年 ハイゼンベルグ BKS 結合則の力学化，ボルン–ヨルダン 結合則の行列表示，ディラック 非可換変数の交換関係，1926 年 シュレディンガー 波動方程式，ボルン ψ の確率解釈，ボルン–ハイゼンベルグ–ヨルダン 行列力学，ディラック 行列力学と波動力学の同等性，1927 年 フォン・ノイマン，ランダウ 密度行列導入，1928 年 ディラック 相対論的電子論，1929 年 ハイゼンベルグ–パウリ 場の量子論]
- 1927 年 コペンハーゲン解釈，アインシュタイン反対表明
- 1930 年 教科書登場 [ディラック著「量子力学の原理」，ハイゼンベルグ著「量子力学の物理的基礎」]
- 1932 年 ノイマン著「量子力学の数学的基礎」で「隠れた変数」否定を宣言
- 1933 年 量子力学にノーベル賞（コラム 7）
- 1935 年 EPR（コラム 10）, [シュレディンガーの猫]
- 1950 年 ボームが EPR のスピン（二状態）版定式化
- 1957 年 隠れた変数に対する Gleason の定理, [多世界解釈（エヴェレ）]
- 1962–65 年 局所隠れた変数に関するベルの不等式
- 1967 年 隠れた変数に関する Kochen–Specker の定理
- 1981 年 アスペらレーザー実験でベル不等式検証
- 量子技術の時代へ [1985 年 量子計算の可能性（ファインマン他），1991 年 量子暗号（エッカルト），1993 年 テレポーテーション実験（ツァイリンガー他），1994 年 ショアのアルゴリズム，2012 年 アロッシュ（キャビティー QED 実験），ワインランド（イオントラップ実験）ノーベル賞]

第 11 章
昇降演算子と物理量の固有状態

調和振動子や角運動量の固有値が整数で分類されることに導かれていく議論にはある共通点がある．その部分を取り出して一般化して，他の問題に応用することを考える．

11.1 昇降演算子

調和振動子の議論に登場した個数オペレータ $a, a^\dagger$ の性質をまとめておく．

$$[a, a^\dagger] = 1,\ \hat{n} = a^\dagger a,\ \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle. \tag{11.1}$$

$(aa^\dagger - a^\dagger a) = 1$ に右から a をかけた $aa^\dagger a - a^\dagger aa = a$ を $|n\rangle$ に作用させれば $(aa^\dagger a - a^\dagger aa)|n\rangle = (a\hat{n} - \hat{n}a)|n\rangle = a|n\rangle$ だから，$\hat{n}(a|n\rangle) = (n-1)(a|n\rangle)$．したがって，$a$ は $a|n\rangle = A|n-1\rangle$ のように n を一つずつ降ろしていくから降演算子であり，定数 A は規格化条件で決められた．同様に $a^\dagger$ は昇演算子である．これらの作用は次のようにまとめられる．

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,\ a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \tag{11.2}$$

このような演算子は合わせて昇降演算子と呼ばれる．

昇降演算子が意味を持つのは物理量がこの昇降演算子で書き表せる場合があるからである．調和振動子ではエネルギーが $H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$ のように表された．すなわち，一般に物理量は $A(q,p)$ のように，粒子運動の変数 p, q の関数であるが，$q = f(a, a^\dagger)$, $p = g(a, a^\dagger)$ のように a に変換することで，$A(q,p) \to B(a, a^\dagger)$ のように物理量が昇降演算子の関数に書き換えられるのである．実際，2.1 節で見たように，調和振動子では

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2C}}[a + a^\dagger],\ p = \sqrt{\frac{\hbar}{2C}}[a - a^\dagger] \tag{11.3}$$

の変換による，$H(q,p)$ から $H(a, a^\dagger)$ への書き換えが意味を持った．

11.2 量子化された不確定性度

5.5 節で正準共役な変数 $\hat{A}, \hat{B}$ の不確定性度の最小の大きさが $\Delta A \Delta B = \hbar/2$ であることを見た．(5.44) 式のようにこの最小不確定状態の状態ベクトルは次の条件を満たすものであった．

$$\left(\frac{\hat{A}'}{\Delta A} + i \frac{\hat{B}'}{\Delta B} \right) |\psi\rangle = 0. \tag{11.4}$$

いま調和振動子での扱いに倣って

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{A}'}{\Delta A} + i \frac{\hat{B}'}{\Delta B} \right) \tag{11.5}$$

と置けば $[a, a^\dagger] = 1$ であり，昇降演算子である．したがって，最小不確定状態 $(a|\psi\rangle = 0)$ の $|\psi\rangle$ は調和振動子の $|0\rangle$ 状態に相当することが分かる．

この状態の $\hat{A}$ 表示での波動関数 $|0\rangle = \sum_A \psi_0(A)|A\rangle$ を求めてみる．$\hat{A}' = \hat{A} - \langle A \rangle$，$\hat{B}' = \hat{B} - \langle B \rangle$ であるから，(11.4) 式は

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial A} - \langle B \rangle \right) \psi_0(A) = i \frac{\Delta B}{\Delta A} (A - \langle A \rangle) \psi_0(q). \tag{11.6}$$

$\Delta A \Delta B = \hbar/2$ を使い，規格化された解を求めると

$$\psi_0(A) = \frac{1}{(2\pi \Delta A^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(A - \langle A \rangle)^2}{4 \Delta A^2} \right] \exp \left[i \frac{\langle B \rangle (A - \langle A \rangle)}{\hbar} \right]. \tag{11.7}$$

これは，$A \to q, B \to p$ と置けば，あたかもガウス分布の波束をもった自由粒子の波動関数の様に見えるが，これは正準共役な一般の変数の最小不確定状態の波動関数である．

この $|0\rangle$ 状態に $a^\dagger$ をかけて構成される状態を考えてみる．まず $\langle n|a|n\rangle = 0$, $\langle n|a^2|n\rangle = 0$ であることに注意すると，$\langle n|\hat{A}'^2|n\rangle = \langle n|\hat{B}'^2|n\rangle$ が導かれる．ここで，$(\Delta_n A)^2 = \langle n|\hat{A}'^2|n\rangle = \langle n|(\delta \hat{A})^2|n\rangle$ のように書けば

$$\Delta_n A \Delta_n B = \frac{1}{2}[(\Delta_n A)^2 + (\Delta_n B)^2] = \langle n| \frac{1}{2}[\delta \hat{A})^2 + (\delta \hat{B})^2]|n\rangle. \tag{11.8}$$

右辺は調和振動子のエネルギーに相当するから，そこの議論を使えば結局

$$\Delta_n A \Delta_n B = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar, \tag{11.9}$$

最小不確定状態 $|0\rangle$ およびそれに昇演算子をかけて構成される状態は $\hbar$ の整数倍の不確定度を持つという特別な意味を持つ．シュビンガーはこれらの $|n\rangle$ 状態について，不確定度を一定に保った変分条件に由来する「停留不確定性の状態」という意味付けを行っている，

11.3 三次元の調和振動子

軌道角運動量は $J_z = xp_y - yp_x, \cdots$ のように q, p で書かれるから，$a, a^\dagger$ で次のように書き表せる．

$$J_x = i\hbar(a_y a_z^\dagger - a_y^\dagger a_z),\ J_y = i\hbar(a_z a_x^\dagger - a_z^\dagger a_x),\ J_z = i\hbar(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y). \tag{11.10}$$

しかし昇降演算子が座標軸ごとの三種類に増えたので，扱いにくいのでいま

$$A = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 \tag{11.11}$$

で定義された量を導入すると，$[J_i, A] = 0$，従って $[J^2, A] = 0$ であることも示せる．

三次元の等方な調和振動子を考えると，$N = a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + a_z^\dagger a_z$ として，

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{3}{2}\right). \tag{11.12}$$

いま $[n, aa] = -2aa$ が簡単に示せるから，$[N, A] = -2A$ となる．これは $A, A^\dagger$ が N の値を 2 ずつ変化させる昇降演算子であることを示す．さらに，これは長い計算を要するが，

$$J^2 = \hbar[N(N+1) - A^\dagger A] \tag{11.13}$$

が示せる．

これらの関係を使ってエネルギー準位を計算してみる．量子数は角運動量の j, m の他に N の固有値 n があり，$|njm\rangle$ と書く．すると各決まった j, m 状態で n が $|0jm\rangle, |1jm\rangle, |2jm\rangle, \cdots$ のような階段状態を取る．一番下の状態は $A|0jm\rangle = 0$ 状態で定義されるから，

$$J^2|0jm\rangle = \hbar^2 N(N+1)|0jm\rangle - \hbar^2 A^\dagger A|0jm\rangle. \tag{11.14}$$

ここで $A|0jm\rangle = 0$ だから $j(j+1)|0jm\rangle = N(N+1)|0jm\rangle$ だから階段の一番下では $N = j$．この状態に $A^\dagger$ をかけることで $|1jm\rangle, |2jm\rangle, \cdots$ などのように階段を上がっていく．各ステップ上がるごとに N は 2 ずつ増加するから $N = 2n + j$ となり，エネルギーは

$$E_{nj} = (2n + 1 + j)\hbar\omega \tag{11.15}$$

と表せる．m には依らないので $2j+1$ の縮退がある．

エネルギー準位を下から見ていくと，一番下が $|00m\rangle$ で次は $|01m\rangle$．そして下から三番目には $|10m\rangle$ と $|02m\rangle$ が同じで，四番目は $|11m\rangle$ と $|03m\rangle$ が同じになる．例えば四番目の縮退状態の数は $(2\times1+1)+(2\times3+1) = 10$ となる．

11.4 水素原子の準位

11.4.1 Runge–Lenz ベクトル

陽子と電子がクーロン力で結合している系が水素原子のモデルである．二体が相対距離で決まるポテンシャルで作用しているから，全ハミルトニアンは

$$H_T = \frac{\boldsymbol{p}_1}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2}{2m_2} + V(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|). \tag{11.16}$$

ここで次のように，重心座標 $\boldsymbol{R}$ と相対座標 $\boldsymbol{r}$,

$$(m_1 + m_2)\boldsymbol{R} = m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2, \ \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2, \tag{11.17}$$

および重心の運動量 $\boldsymbol{P}$ と相対運動量 $\boldsymbol{p}$,

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2, \ \boldsymbol{p} = \frac{m_2\boldsymbol{p}_1 - m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1 + m_2} \tag{11.18}$$

を定める．これらの新しい変数を用いると H_T は次のように，重心の自由運動と相対座標で記述される運動 $H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})$ とに分かれる．

$$H_T = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}), \quad H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r). \tag{11.19}$$

ここで $M = m_1 + m_2, \quad m = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ である．$[\boldsymbol{P}, H_T] = 0$ だから，$\boldsymbol{P}$ は運動の定数であり，重心は一定速度で運動するに過ぎないから，以下では $H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})$ を議論する．クーロン力では電荷を e と書いて $V(r) = -\frac{e^2}{r}$.

運動方程式は

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -\nabla V(r) = -e^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}. \tag{11.20}$$

両辺に角運動量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ を外積的にかける．すなわち

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} \times \boldsymbol{L} = -e^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \times \boldsymbol{L}. \tag{11.21}$$

したがって

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \times \boldsymbol{L} = m\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \times \left(\boldsymbol{r} \times \frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\right) = m\frac{\boldsymbol{r}}{r^2} \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} - m\frac{1}{r}\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = -m\frac{d}{dt}\frac{\boldsymbol{r}}{r} \tag{11.22}$$

だから

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} \times \boldsymbol{L} - e^2m\frac{d}{dt}\frac{\boldsymbol{r}}{r} = 0. \tag{11.23}$$

一方，

$$\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = m\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} \times \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} + \boldsymbol{r} \times \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = -e^2\boldsymbol{r} \times \left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) = 0 \tag{11.24}$$

だから，上式は

$$\boldsymbol{D} = \frac{1}{m}\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - \frac{e^2}{r}\boldsymbol{r} \ \text{とすれば} \ \frac{d}{dt}\boldsymbol{D} = 0 \tag{11.25}$$

となり，$\boldsymbol{D}$ が保存量であることを示している．このベクトルは Runge–Lenz ベクトルと呼ばれる．この方向は $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{D}=0$ から分かるように，角運動量に垂直な平面内にある．

いま $\boldsymbol{D}$ の方向から角度を測ることにすれば $\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{r}=Dr\cos\phi$．また

$$\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{r}=\frac{1}{m}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{r}-\frac{e^2}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{r}=\frac{L^2}{m}-e^2r \tag{11.26}$$

であるから，次のような軌道の方程式が得られる．

$$r=\frac{L^2/e^2m}{1+(D/e^2)\cos\phi}=\frac{\ell}{1+\epsilon\cos\phi}. \tag{11.27}$$

束縛状態は離心率 ϵ が $\epsilon<1$ の場合である．いま $\boldsymbol{D}$ 方向に x 軸を取り，$\phi=0$ と $\phi=\pi$ の中点に原点を取り，xy 座標を定める．すると上の軌道の方程式は

$$\frac{x^2}{(\frac{\ell}{1-\epsilon^2})^2}+\frac{y^2}{(\frac{\ell}{\sqrt{1-\epsilon^2}})^2}=1 \tag{11.28}$$

という楕円の標準形で書ける．

Runge–Lenz ベクトルの方向は楕円の長軸の方向を表し，またその大きさと角運動量で軌道が決まる．普通は軌道は角運動量の大きさとエネルギーで決まるとされているから，D と L^2 から軌道が決まることになっている．

11.4.2 Runge–Lenz–Pauli オペレータ

Runge–Lenz ベクトルの大きさ $D^2=\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{D}$ とエネルギーの関係は次の計算で分かる．

$$D^2=\frac{1}{m^2}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})-\frac{2e^2}{mr}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{r}+e^4=\frac{2H}{m}L^2+e^4. \tag{11.29}$$

ここで $H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{m}-\frac{e^2}{r}$ はエネルギー，またベクトル公式 $(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{d})=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{d})-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{d})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c})$ を用いた．

こうして量子力学に移行した時も，エネルギーの固有値を求める代わりにオペレータ $\hat{\boldsymbol{D}}$ の固有値を求めることにしてもよいことが分かる．ただし $\hat{\boldsymbol{D}}$ は互いに非可換なオペレータの積を含んでいる．例えば，$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}$ の z 成分

$$p_xLy-p_yL_x\to\frac{1}{2}(p_xL_y+L_yp_x)-\frac{1}{2}(p_yL_x+L_xp_y) \tag{11.30}$$

のように積の順序を対称化する必要がある．こうした対称化をすれば

$$\hat{\boldsymbol{D}}=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})-\frac{e^2}{r}\boldsymbol{r}. \tag{11.31}$$

こうしておけば $\hat{\boldsymbol{D}}^\dagger=\hat{\boldsymbol{D}}$ となり，自己共役なオペレータとなる．これは Runge–Lenz–Pauli オペレータと呼ばれる，このベクトル・オペレータの内積の計算は非可換性を考慮して行う必要があり，相当長い計算を要する．しかし結果は

$$D^2=\frac{2H}{m}(L^2+\hbar^2)+e^4 \tag{11.32}$$

であり，(11.29) 式の L^2 に $\hbar^2$ が付加されただけである．

エネルギーではなくて Runge–Lenz–Pauli オペレータに着目するのは，このオペレータとしての性質が角運動量オペレータと同じように昇降演算子に置き換えた議論ができるからである．いま $\boldsymbol{D}$ の成分の間の交換関係を計算すると

$$[D_i, D_j] = i\hbar\left(\frac{-2H}{m}\right)\sum_k \epsilon_{ijk}L_k. \tag{11.33}$$

$\boldsymbol{K} = \sqrt{\frac{m}{-2H}}\boldsymbol{D}$ と規格化し直せば

$$[K_i, K_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}L_k. \tag{11.34}$$

この $\boldsymbol{K}$ を用いればエネルギーは

$$H = -\frac{me^4}{2(K^2 + L^2 + \hbar^2)}. \tag{11.35}$$

K_i は L_j と次のように関係している．

$$[K_i, L_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}K_k. \tag{11.36}$$

そこで

$$M_i = \frac{1}{2}(L_i + K_i),\ N_j = \frac{1}{2}(L_j - K_j) \tag{11.37}$$

を用いれば

$$[M_i, M_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}M_k,\quad [N_i, N_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}N_k. \tag{11.38}$$

また $[M_i, N_j] = 0$ である．

$\boldsymbol{D}$ と $\boldsymbol{L}$ が直交している条件をまだ使っていない．$\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{K} = 0$ を $\boldsymbol{M}$ と $\boldsymbol{N}$ に対する条件に書き換えると，

$$(\boldsymbol{K} + \boldsymbol{L})^2 - (\boldsymbol{K} - \boldsymbol{L})^2) = \frac{1}{4}(\boldsymbol{M}^2 - \boldsymbol{N}^2) = 0 \tag{11.39}$$

である．すなわち $\boldsymbol{M}^2$ と $\boldsymbol{N}^2$ の固有値は同じでなければならない．したがって

$$K^2 + L^2 + \hbar^2 = 2(M^2 + N^2) + \hbar^2 = 4M^2 + \hbar^2$$
$$= [4\ell(\ell + 1) + 1]\hbar^2 = (2\ell + 1)^2\hbar^2. \tag{11.40}$$

ℓ は半整数であるから，$2\ell + 1 = n$ は整数となる．こうして

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2},\ n = 1, 2, 3, \cdots. \tag{11.41}$$

第 12 章

測定理論

量子系の測定というのは物指しを当てて目盛りを読んだり，電流の作る磁場でメーターの針の動く長さを測る過程とは大分異なる．むしろ，用意された回答欄（チャネル）のどれに反応するかの回数を数えることである．回答欄を用意するのが測定器や実験のセットである．測定の対象である系 S と作用した測定器 M の状態をチェックする．測定の実態は制御や加工の技術の進歩でその具体的な物理過程は多様化している．そうした具体的物理過程に立ち入らずに測定過程の一般的な形式を議論する．

12.1 測定過程の形式理論

12.1.1 フォン・ノイマンの確率演算子

量子力学の測定問題とはオペレータと状態ベクトルの枠組みを測定による期待値 $\langle A\rangle$ に結ぶことであるが．これには次の二つの方式がある．

1. $|\psi\rangle$ による $\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$
2. 密度行列 ρ による $\langle A\rangle = \mathrm{Tr}(\rho\hat{A})$

この二つは純粋状態 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ では同等である．

純粋状態 $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i|i\rangle$ での期待値は $\hat{A} = \sum_i a_i\Pi_i$ だから

$$\langle A\rangle = \sum_i a_i\langle\psi|\Pi_i|\psi\rangle = \sum_i a_i \,\mathrm{Pr}(i) = \sum_i a_i|\alpha_i|^2. \tag{12.1}$$

$\mathrm{Pr}(i)$ は $\hat{A}$ が確定値 a_i を取る状態の確率と解釈される．ここで「確定値を取る」とは $\langle(\hat{A}-\langle A\rangle)^2\rangle = 0$ の意味である．

密度行列は一般には次のような混合密度行列 $\rho = \sum_\alpha p_\alpha|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|$ で与えられ，期待値は

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}(\rho\hat{A}) = \sum_\alpha p_\alpha[\sum_i\langle i|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|\hat{A}|i\rangle]$$

$$= \sum_\alpha p_\alpha \langle\psi_\alpha| \left(\sum_i a_i |i\rangle\langle i|\right) |\psi_\alpha\rangle \tag{12.2}$$

であり，$\langle A\rangle$ は個々の純粋状態 ($|\psi_\alpha\rangle$) に対する期待値の混合度 (p_α) での平均値となっている．

ここで射影演算子 Π_i という数学的量を物理的観測量として扱っている．ρ と Π_i を基本要素とするのがフォン・ノイマンによる大きな飛躍である．ここで導入される確率を与える演算子 Π_i は次の条件を満たしている．

1. エルミット共役，$\Pi_i^\dagger = \Pi_i$
2. 正値，$\langle\psi|\Pi_i|\psi\rangle = |\langle i|\psi\rangle|^2 \geq 0$
3. 完全，$\sum_i \Pi_i = \sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{I}$
4. 直交，$\Pi_i\Pi_j = \Pi_i\delta_{ij}$

条件 1 で物理量としての条件を満たし，条件 2 と 3 で確率と解釈できる条件を満たし，条件 3 と 4 は $\hat{A}$ の固有状態の規格直交性を引きずっている．条件 4 から導かれる $\Pi_j(\Pi_i|\psi\rangle) = \delta_{ji}(\Pi_i|\psi\rangle)$ という関係が示す様に射影された状態 $\Pi_i|\psi\rangle$ のオペレータ Π_i に対する固有値は δ_{ji}，すなわち，1 か 0 である．また規格化された固有状態は $\Pi_i|\psi\rangle/\mathrm{Pr}(i)$ である．一般に射影オペレータ $\Pi_m = |m\rangle\langle m|$ は条件 1 と 2 を満たす．あるいは条件 1 ならヒルベルト空間の大前提から条件 2 である．

これに対し条件 3 と 4 は射影オペレータのセット $\{\Pi_j\}$ としての性質である．この意味で Π_i は POM(probability operator measure) である．ここで measure（測度）とは確率論の概念であるが，その枠組みでみると条件 4 は外すことができる．これが後に見る POM の直交射影オペレータから POVM への拡張である．

12.1.2 測定後状態

いま測定タイプのセット $\{\Pi_j\}(j = 1, 2, \cdots)$ の一つである Π_i による測定で 1 か 0 かの内の 1 が確認されたなら，測定後の状態密度 ρ は Π_i の作用を受けて

$$\rho \to \rho_i' = \frac{\Pi_i\rho\Pi_i}{\mathrm{Tr}(\Pi_i\rho\Pi_i)} = \frac{\Pi_i\rho\Pi_i}{\mathrm{Pr}(i)} \tag{12.3}$$

と変化する．しかし，測定は為されたが測定のセット $\{\Pi_a\}$ の結果が 1 か 0 か未知の場合には状態 ρ' は次のような混合状態にあると見なされる．

$$\rho' = \sum_i \mathrm{Pr}(i)\rho_i' = \sum_i \Pi_i\rho\Pi_i. \tag{12.4}$$

ここで ρ, ρ_i', ρ' の三種類の状態密度が登場している．例えば，$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i|i\rangle$ の純粋状態 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ なら

$$\rho = (\sum_i \alpha_i|i\rangle)(\sum_j \alpha_j^*\langle j|), \tag{12.5}$$

$$\rho' = \sum_i |\alpha_i|^2 |i\rangle\langle i| = \sum_i |\alpha_i|^2 \rho'_i. \tag{12.6}$$

ρ と ρ' の差は測定をしたかどうかであり，ρ' と ρ'_i の差は測定 Π_i の結果が yes かどうかを知ってるか知らないかである．測定の有無の情報もない状態は ρ, ρ' の何れか明らかでないが，統計量に関しては

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}(\rho\hat{A}) = \mathrm{Tr}(\rho'\hat{A}) \tag{12.7}$$

と同じ結果を与える．$\langle\Delta A^2\rangle$ に関しても同様である．要するにこうした統計量が対象に関する情報の全てだとすれば，ρ と ρ' の区別はつかないのである．また $|\psi\rangle$ と ρ の差も表面化しないのである．したがって,「対象に関する情報は統計量だけか？」という問題が浮かび上がる．また,「測定後の状態」の意味もそれほど明確ではない．こうした点には後に立ち返ることになる．

12.1.3 個別イヴェントと統計量

測定タイプのセット $\{\Pi_j\}$ の中の個々の Π_i は a_i の測定に yes-no（1 か 0）の結果を返す測定である．例えば，シュテルン–ゲルラッハ実験でスピンを持つ粒子が「上方」か「下方」に振り分けられるが,「上方」を Π_1,「下方」を Π_2 と置けば，何れかに必ず行くのだから $\Pi_1 + \Pi_2 = \hat{I}$ である．粒子一個の個別のイヴェントでは Π_1 か Π_2 の何れかが yes で他は no である．

同じ状態 $|\psi\rangle = \alpha_1|1\rangle + \alpha_2|2\rangle$ に用意した N 個の粒子で測定した結果が「上方」に N_1 回 yes,「下方」に N_2 回 yes だったとすれば

$$\sum_i |\alpha_i|^2 |i\rangle\langle i| N \to \infty \text{ で，} \frac{N_1}{N} \to |\alpha_1|^2,\ \frac{N_2}{N} \to |\alpha_2|^2 \tag{12.8}$$

のように二次的に確率という統計量が得られる．一方，量子力学の状態指定から理論的に

$$\langle\Pi_1\rangle = |\alpha_1|^2,\ \langle\Pi_2\rangle = |\alpha_2|^2 \tag{12.9}$$

と確率が計算される．また相関 $\langle\Pi_1\Pi_2\rangle = 0$ である．

このように，オペレータのセット $\{\Pi_i\}$ は，物理変数に対応したオペレータと同様に，ベクトルに作用して他のベクトルに変換したり，期待値として確率を与えるのである．

しかし，Π_j を粒子の位置やエネルギーなどの物理量と同等のものであると見なすことには抵抗もある．何故なら測定という概念には時空上に実在している対象が保持する物理量を引き出すというイメージがあるからである．粒子が保持している位置やエネルギーの情報を引き出すのである．それに対して，yes-no 情報を引き出すと言うのは測定装置に依存した引き出し方である．ただ，物理量の場合でも $\langle A\rangle$ や $\langle(\hat{A} - \langle A\rangle)^2\rangle$ のような統計量はデータを二次的に処理して得られるものである．このように測定を統計情報を引き出すことだと見なせ

ば，両者は同種となる．

12.1.4 確率測度と物理量の期待値

確率演算子に様々な物理量と同等な資格を与えることは測定量の固有状態からも独立した確率測度を想定することになる．すなわち $\langle A\rangle$ の算出に必ずしも $\hat{A}$ の固有状態でスペクトル分解する必要はない．一般には，

$$\langle A\rangle = \langle\psi|(\sum_j |b_j\rangle\langle b_j|)[\sum_i a_i|a_i\rangle\langle a_i|](\sum_j |b_j\rangle\langle b_j|)|\psi\rangle$$

$$= \sum_{ij} a_i|\langle a_i|b_j\rangle|^2|\langle b_j|\psi\rangle|^2 = \sum_{ij} a_i P(a_i|b_j)P(b_j). \tag{12.10}$$

ここで $P(a_i|b_j)$ はある決まった b_j の条件下での a_i についての確率と解釈できる．原理的には $P(a_i|b_j)$ は理論的に与えられるものであり，$P(b_j)$ は実験データが与えるものである．

$P(a_i)$ による $\langle A\rangle$ の算出法と比較すれば，$P(a_i) = \sum_j P(a_i|b_j)P(b_j) = \sum_j P(a_i, b_j)$ である．また a_iと b_j を置き換えた同様の議論から $P(b_j) = \sum_i P(b_i|a_j)P(a_i) = \sum_i P(a_i, b_j)$．これらから，次のベイズの関係が導かれる．

$$P(a_i|b_j) = \frac{P(b_j|a_i)P(a_i)}{P(b_j)}. \tag{12.11}$$

12.2 量子情報理論への拡張

測定とは統計情報を得ることであれば，オペレータと状態ベクトルで記述される対象世界と測定情報を繋ぐのは統計学の理論であるとなる．確率を与えるオペレータを確率測度と見なせば，直交射影演算子 Π_j が満たす条件 1,2,3,4 のうち，条件 4 は外してもよい．$\{\Pi_j\}$ から構成される新たな測定の測度を導入できる．

この点を巡っては量子力学成立当初から論争の的であるが，数理的な内部整合性に留意しながら，この立場に徹底しているのが量子情報理論であると言える．以下ではこの立場からの「拡張」をいくつか述べる．現段階では，この立場に立たない場合でも，この分野の展開を踏まえなければならないからである．

12.2.1 一般の確率測度 POVM

量子情報理論への「拡張」には次の二つの側面がある．

- 確率オペレータを射影オペレータから一般の POVM に拡張する．
- 密度行列を純粋状態から混合状態に拡張する．

これらの「拡張」により，測定値を与える方式は密度行列方式に限られることになる．まず確率オペレータも密度行列方式も物理系の量子力学ではあまり

用いられない概念であるが，何れもフォン・ノイマンの「数学的基礎」の中で導入されたものである．しかし POVM は量子情報理論の中でフォン・ノイマンの射影オペレータを拡張したものである．混合状態への拡張は対象の拡張であるが，POVM への拡張は視点を対象から測定方式に移行させることであると言える．

$\Pi_m|\psi\rangle = \langle m|\psi\rangle|m\rangle$ のように射影されたベクトルとそれに垂直なベクトル $|\psi'\rangle = |\psi\rangle - \langle m|\psi\rangle|m\rangle$ もヒルベルト空間のベクトルであることの要請 $\langle\psi'|\psi'\rangle \geq 0$ から，$P(m) = \langle\psi|\Pi_m|\psi\rangle$ が確率に採用できる必要条件 $1 \geq P(m) \geq 0$ が結論される．このように勝手に用意した Π_m と Π_n から $1 \geq p \geq 0$ なる p を用いて構成した $\hat{E} = p\Pi_m + (1-p)\Pi_n$ も $\langle\psi|\Pi_m|\psi\rangle = pP(m) + (1-p)P(n)$ だから確率としての必要条件を満たす．

上述の考察は，条件 4 の性質を外せば，条件 3 の性質を満たすセット $\{\hat{E}_a\}$ を自由に構成できる可能性を示唆している．このようなオペレータは POVM(positive value measure) と呼ばれる．条件 2 の「正値」に触れて条件 3 の完全性には触れていないようだが「正値」のオペレータのセットなら，規格化すれば「完全」セットにできる．測度 (measure) とは確率論の概念であり，確率論の測度を直交射影オペレータから POVM に拡張したと言ってよい．

例 1：二値状態での $\hat{P}_1 = |0\rangle\langle 0|,\ \ \hat{P}_2 = |1\rangle\langle 1|$ から

$$\hat{E}_1 = p\hat{P}_1 + (1-p)\hat{P}_2,\ \hat{E}_2 = (1-p)\hat{P}_1 + p\hat{P}_2 \tag{12.12}$$

を構成すると $\sum_a \hat{E}_a = \hat{I}$ なる条件 3 を満たす．しかし $\hat{E}_1\hat{E}_2 = p(1-p)[\hat{P}_1 + \hat{P}_2] = p(1-p)\hat{I}$ だから直交条件 4 は満たさない．

いま与えられた状態でのこれらの POVM の期待値を表に示す．

状態	$\langle E_1\rangle$	$\langle E_2\rangle$
$\|0\rangle$	p	$1-p$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|0\rangle + \|1\rangle)$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$\|1\rangle$	$1-p$	p
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|0\rangle - \|1\rangle)$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

例 2：同じように二値状態でまず

$$\hat{E}_1 = p|1\rangle\langle 1|,\ \hat{E}_2 = (1-p)\frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle)(\langle 0| - \langle 1|) \tag{12.13}$$

と勝手に二つを導入した上で

$$\hat{E}_3 = \hat{I} - \hat{E}_1 - \hat{E}_2 \tag{12.14}$$

にとれば，セット $\{\hat{E}_1, \hat{E}_2, \hat{E}_3\}$ は条件 3 を満たす．$\hat{E}_3$ は次のようにも書ける．

$$\hat{E}_3 = \frac{1+p}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1-p}{2}|1\rangle\langle 1| + (1-p)(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|). \tag{12.15}$$

状態	$\langle E_1\rangle$	$\langle E_2\rangle$	$\langle E_3\rangle$
$\|0\rangle$	0	$\frac{1-p}{2}$	$\frac{1+p}{2}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|0\rangle+\|1\rangle)$	$\frac{p}{2}$	0	$1-\frac{p}{2}$
$\|1\rangle$	p	$\frac{1-p}{2}$	$\frac{1-p}{2}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|0\rangle-\|1\rangle)$	$\frac{p}{2}$	$(1-p)$	$\frac{p}{2}$

12.3 直接測定と間接測定

12.3.1 エンタングルメントと射影演算子

今度は測定器の応答が yes-no ではなく，ある標準状態 0 から複数の状態 m へ転移する装置だとする．測定過程は，対象系 S と測定器 M を作用させて，基準状態にあった M の状態 ($|0\rangle_M$) を変化させ，その後に M への直接観測（射影）を行う，となる．S と M の作用のユニタリー変換を U_M として

$$|\psi\rangle|0\rangle_M \to U_M|\psi\rangle|0\rangle_M = U_M\left(\sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle|0\rangle_M\right)$$

$$= \sum_i \langle a_i|\psi\rangle U_M(|a_i\rangle|0\rangle_M) = \sum_i \alpha_i\left(\sum_m \gamma(i)_{0m}|a_i\rangle|m\rangle_M\right). \quad (12.16)$$

そして測定後の状態は $\dfrac{\gamma(i)_{0m}\alpha_i|a_i\rangle|m\rangle_M}{|\gamma(i)_{0m}|^2|\alpha_i|^2}$ である．

ここで「測定後」とは「S と M の状態が $|a_i\rangle$ および $|m\rangle_M$ であることを確認した」の意味である．確認は on-off で検定で行う．

多数回の測定を繰り返して得られた確率 $P(m:\psi)=|\gamma(i)_{0n}|^2|\alpha_i|^2$ において $|\gamma(i)_{0m}|^2$ は既知だから，実験データ $P(m:\psi)$ から S に関する情報 $|\alpha_i|^2$ を獲得することができる．S の状態を M の状態に乗移らせて，M の状態を測定するのでこれは間接測定と言われる．それに対して直接測定とは，S の状態 $|\psi\rangle$ を M の相対スペクトル $\sum_m |m\rangle\langle m|$ で分解して，確率 $|\langle m|\psi\rangle|^2$ を測定することをいう．

いま u_{mn}をユニタリー行列の成分として，$U_M = \sum_i\sum_m\sum_n u(i)_{mn}|a_i\rangle\langle a_i||m\rangle\langle n|$ を定義して，$|\psi\rangle|0\rangle$ に作用させたのが上の表記であり，$\gamma(i)_{0m}$ は $u(i)_{0m}$ である．一番簡単に，S（+ と −）も M（0 と 1）も二状態からなるとする．$1\geq p\geq 0$ として，$|\psi\rangle=\sqrt{p}|+\rangle+\sqrt{1-p}|-\rangle$.

$$U_M|\psi\rangle|0\rangle = \sqrt{p}(u(+)_{00}|0\rangle+u(+)_{01}|1\rangle)|+\rangle+\sqrt{1-p}(u_{00}|0\rangle+u_{01}|1\rangle)|-\rangle$$

$$= (\sqrt{p}u(+)_{00}|+\rangle+\sqrt{1-p}u(-)_{00}|-\rangle)|0\rangle$$

$$+ (\sqrt{p}u(+)_{01}|+\rangle+\sqrt{1-p}u(-)_{01}|-\rangle)|1\rangle. \quad (12.17)$$

測定器の初期状態を $|1\rangle$ にセットした場合は

$$(\sqrt{p}u(+)_{10}|+\rangle + \sqrt{1-p}u(-)_{10}|-\rangle)|0\rangle$$

$$+(\sqrt{p}u(+)_{11}|+\rangle + \sqrt{1-p}u(-)_{11}|-\rangle)|1\rangle$$

である．

典型的な U として

$$U(+) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\ U(-) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{12.18}$$

を取ったとすれば

$$U_M|\psi\rangle|0\rangle = \sqrt{p}|+\rangle|0\rangle + \sqrt{1-p}|-\rangle|1\rangle, \tag{12.19}$$

$$U_M|\psi\rangle|1\rangle = \sqrt{p}|+\rangle|1\rangle + \sqrt{1-p}|-\rangle|0\rangle. \tag{12.20}$$

12.3.2 シュレディンガーの猫：生き返る猫？

この装置では，量子系である放射性核の崩壊を測定器でキャッチしたとすれば，その後は古典的過程で猫の死をもたらす．いま (12.20) 式で $|+\rangle \to$ 崩壊「前」，$|-\rangle \to$ 崩壊「後」，また $|0\rangle \to$ 猫は「生」，$|1\rangle \to$ 猫は「死」と対応づけてみる．放射性核であるから $p(t) = e^{-t/T}$．もし測定器のスイッチが切ってあれば，U_M が働かずに $U_M = \hat{1}$ だから $U_S(t)|\text{前}\rangle|\text{生}\rangle = |\psi(t)\rangle|0\rangle = (\sqrt{p(t)}|\text{前}\rangle + \sqrt{1-p(t)}|\text{後}\rangle)|\text{生}\rangle$ のように，「崩壊」でも猫は生きている．

一方，U_M が作動しておれば

$$U_M U_S|\text{前}\rangle|\text{生}\rangle = \sqrt{p}|\text{前}\rangle|\text{生}\rangle + \sqrt{1-p}|\text{後}\rangle|\text{死}\rangle \tag{12.21}$$

となり，シュレディンガーの議論のように確率 $(1-p)$ で猫は死んでいる．ところが，初期設定で死んだ猫を入れておけば，(12.20) 式は

$$U_M U_S|\text{前}\rangle|\text{死}\rangle = \sqrt{p}|\text{前}\rangle|\text{死}\rangle + \sqrt{1-p}|\text{後}\rangle|\text{生}\rangle \tag{12.22}$$

となる．奇妙なことに死んでた猫が生き返ることになるが，これは U_M をユニタリーとすると避けられないことである．この不適切な結論の原因がユニタリー性の正否にあるのではない．測定器の目盛りが単に「生」か「死」の表記のことだと解すれば，初期に「死」にセットしても時間が経てば確率 $(1-p)$ で目盛りが「生」に変わるのは正しいのである．「奇妙」なのは，「死」という表示がでた時に猫の「生」を「死」に変える古典過程は存在するが，「生」と表示がでても猫を「死」から「生」に変える古典過程が存在しなことである．この古典過程の非対称性がこの議論を謎めいたものにしているのである．と同時にサイバー上（広く記号に還元できる世界）と現実での情報というものの差異について深く考えさせる．

12.4 測定過程に伴う不確定性

S 系の状態を M 系の状態の測定で推定するのであるが，ここで両者の間に次のような二つの測定値のばらつきが生じることを考慮せねばならない．

1. M の S への作用によっての S の状態が擾乱を受けることに由来する誤差．
2. S の測定される変数が M に正確に伝えられないことに由来する誤差．

誤差といっても S と M の相互作用はユニタリー変換の作用に基づくものであるから，それが与えられればこれらの誤差は一義的に計算できる．

12.4.1 測定作用の具体例

例えば S 系の変数 $\hat{q}_S$ と M 系の変数 $\hat{p}_M$ が次のように与えられているとする．

$$H_{int} = g(t)\hat{q}_S\hat{p}_M. \tag{12.23}$$

$g(t)$ は短い時間間隔だけ作用することを表現するもので，$g_0 = \int g(t)dt$ とする．変数 $\hat{A}$ のこの間の変動は全体のハミルトニアンを $H = H_0 + H_{int}$ と書いて

$$\hbar\frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{A}, H_0] + [\hat{A}, H_{int}] \tag{12.24}$$

で与えられる．したがって作用前後の差は

$$\Delta A = \hat{A}(t) - \hat{A}(0) = \frac{i}{\hbar}\int[H_0, \hat{A}]dt + g_0\frac{i}{\hbar}[\hat{q}_S\hat{p}_M, \hat{A}] \tag{12.25}$$

となるが，作用時間を十分短くすれば H_0 による変化は無視できるので ΔA は H_{int} のみで決まると考えてよい．

いま $\hat{A}$ として考える変数は $[q_S, p_S] = [q_M, p_M] = i\hbar$ などを満たすので

$$\Delta q_S = 0,\ \Delta p_S = -g_0\hat{p}_M, \tag{12.26}$$

$$\Delta q_M = g_0\hat{q}_S,\ \Delta p_M = 0. \tag{12.27}$$

これらは例えば

$$\Delta p_S = g_0\frac{i}{\hbar}[\hat{q}_S\hat{p}_M, \hat{p}_S] = g_0\frac{i}{\hbar}\hat{p}_M[\hat{q}_S, \hat{p}_S] = -g_0\hat{p}_M \tag{12.28}$$

のように計算できる．

この効果は一つは S 系への擾乱 $D(p_S) = \Delta p_S = -g_0 p_M$ であり，二つ目は M 系の測定誤差 Δq_M に伴う S 系の変数の誤差 $N(q_S) = (1/g_0)\Delta q_M$ である．擾乱の大きさ $D(p_S)$ と測定の誤差 $N(q_S)$ の分散を $\eta(p) = \langle D(p_S)^2\rangle^{1/2}$，$\epsilon(q) = \langle N(q_S)^2\rangle^{1/2}$ を書けば，$\langle p_M\rangle = 0$ として，

$$\epsilon(q)\eta(p) = \langle\Delta q_M^2\rangle^{1/2}\langle\Delta p_M^2\rangle^{1/2} \geq \frac{1}{2}|\langle[q_M, p_M]\rangle| = \frac{\hbar}{2}. \tag{12.29}$$

12.4.2 測定過程の一般化

前の測定モデルではS系の測定量を正準共役な変数としたが，これを一般の $\hat{A}_S$ と $\hat{B}_S$ に拡張してみる．相互作用は

$$H_{int} = g(t)\hat{p}_M \hat{A}_S \tag{12.30}$$

とする．M系では $\hat{p}_M$ に正準共役な変数 $\hat{q}_M$ を測定する．$\hat{q}_M(0) = 0$ にセットした場合の変化は $\hat{q}_M(t) = g_0\hat{A}_S$ だから $\hat{A}_S = \hat{q}_M(t)/g_0$ となる．一方，作用による $\hat{B}_S$ の変化は

$$\frac{d\hat{B}_S}{dt} = g(t)\frac{i}{\hbar}[\hat{A}_S, \hat{B}_S]\hat{p}_M \tag{12.31}$$

で与えられる．前と同じような議論をすれば，次のような分散の式が得られる．

$$\begin{aligned}&\langle \Delta A_S^2 \rangle^{1/2} \langle \Delta B_S^2 \rangle^{1/2} \\ &= |\langle [\hat{A}_S, \hat{B}_S] \rangle| \frac{\langle \Delta q_M^2 \rangle^{1/2} \langle \Delta p_M^2 \rangle^{1/2}}{\hbar} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}_S, \hat{B}_S] \rangle|.\end{aligned} \tag{12.32}$$

可換な変数の測定では分散のない測定が可能であることが分かる．

12.4.3 不確定性関係の意味

「ハイゼンベルグの不確定性関係 $(\Delta q \Delta p \geq \hbar/2)$」は量子力学を語る際に必ず登場するものである．ハイゼンベルグが1927年に提出した議論には測定値の分散の二つの原因

1. 交換関係に由来するS系に固有な分散
2. S系と測定系Mの作用に由来する分散

が明確には分離されていなかった．数式的には第一の意味だが,「ガンマ線顕微鏡での電子の位置の測定」という説得性のある議論は第二の意味である．第二の意味の分散は測定という行為が不可避的にS系を擾乱してしまうという不可知論の哲学と共鳴するのである．しかし前記の議論が示唆しているように，測定値の分散は第二の意味で発生するというよりは「固有な分散」が測定過程を通じても測定値の分散に引き継がれるのである．ハイゼンベルグの「ガンマ線顕微鏡での電子の位置の測定」ではM系は制御不可能な擾乱の原因として描かれるが，実際はユニタリーな相互作用であるから「擾乱」のイメージとは大きく異なる．

S系とM系の作用による状態ベクトルの変化を見てみる．

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_q \sum_Q \psi(q, Q, t)|q\rangle|Q\rangle, \tag{12.33}$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-ig_0\hat{q}\hat{P}/\hbar}|\Psi(0)\rangle = \sum_q \sum_Q \psi(q, Q, 0)e^{-ig_0\hat{q}\hat{P}/\hbar}|q\rangle|Q\rangle$$

$$= \sum_q \sum_Q \phi(q,0)\Phi(Q,0)|q\rangle|Q+g_0q\rangle = \sum_q \sum_Q \psi(q,Q,t)|q\rangle|Q\rangle. \quad (12.34)$$

ここで初期は積状態であったとして $\psi(q,Q,0) = \phi(q,0)\Phi(Q,0)$ と書いた．しかし作用後は

$$\psi(q,Q,t) = \phi(q,0)\Phi(Q-g_0q,0) \quad (12.35)$$

であり，状態は積状態からエンタングルした状態に変わったことになる．

$$\Pr(Q) = \langle\Psi(t)||Q\rangle\langle Q||\Psi(t)\rangle = \int_q |\phi(q,0)|^2|\Phi(Q-g_0q,0)|^2dq. \quad (12.36)$$

この式は Q の測定値の分散は q 状態の分散と Q 状態の分散に由来することを示している．もし q の収縮後の確定状態が知り得たとすれば，分散は準備された M 系の分散に由来する．同様に，Q が確定なら，$|\phi(Q/g_0,0)|^2$ のように q の分散を拾うことになる．

12.5 測定後の状態ベクトル：コペンハーゲン解釈と多世界解釈

測定に伴って，$|\psi\rangle(=\sum_i \alpha_i|i\rangle) \to |i\rangle$ のように，重なっていた状態 $|\psi\rangle$ がその内の一つ $|i\rangle$ に「収縮する (collapse)」というのがコペンハーゲン解釈である．測定後の状態ベクトルへの変化は情報ではなくモノを扱う物理学には馴染まないものであり，標準解釈とされながらも次の様な議論が絶えない：（イ）収縮の時間的過程を記述する理論が無い，（ロ）収縮は観測値を知るという主観的な認知に関連するものにみえる，（ハ）収縮で実現せずに捨てられた可能性の行き先の問題，などである．（イ）については，重なった状態間の干渉性が失われていく物理過程に関するデコヒーレンス (decoherence) 理論の進展があったが，それでも重なった状態は保持されているから収縮の問題は残されたままである．（ロ）に関連しては外界と認識者の境界を低くみる非西洋思想などが語られたが，収縮を外界と認知の間のどこに設定するかが論点の一つである．

コペンハーゲン解釈を越えるとする多くの議論が提起されてきたが，それらは実在論と情報論を両極端にして多くは両者の折衷になっている．実在論はモノとコトに別対応する場合もあり，情報論には傍観者 (observer) と参加者 (participator) の差がある．

1. 多世界 (many-worlds, parallel-worlds)：数式で書かれるものは全て実在だという究極の実在論であり，状態ベクトルも実在とする．量子コンピュータなどの課題では，操作の対象は状態ベクトルであり，その存在感が増している．ここでは収縮は起こらずに重なった可能な多世界の全てが存在し続ける．上記の（ハ）には簡潔に実在論で答えている．しかし，確率解釈には新たな工夫が必要になり，観測者がある世界に迷い込む確率という様

な情報理論が登場する．

2. 無撞着歴史 (consistent-history)：まず因果性を連続した古典的測定事象（これを歴史という）の推論法と見なし，因果性のもと主観的に予想する歴史シナリオの確率を客観的に評価するのが量子力学であるとする．歴史は密度行列の積で与えられ，そのトレースが確率を与える．ここでは問う主体が中核をなすという意味で実存的とも表現される．「どうなってるか？」という傍観者的な態度でなく，主体がある意図をもって発する問いを扱うという意味では社会科学の様な学問的位置づけになる．

5.3.1 節で述べたように，数理的には，状態ベクトルは確率計算のための中間的ツールであって，確率計算はトレースで得られるとする手法もある．状態ベクトル（波動関数）を理論の前面から消していければ，収縮問題など多くの論争点は霧散する．

コラム9 素朴実在論の踏み絵と「炎上」

アインシュタインを初めとする現在の量子力学への不満が表明される根拠をひとことで言うのはむずかしい．明らかに物理学内の議論に収まることではない.「物理学のあるべき姿」,「科学のあるべき姿」,「学問のあるべき姿」などという，より広い価値観にかかわるところにはみ出していく．筆者は量子力学の論争は学問論の齟齬であると考えて様々に論じているが，ここではできるだけ物理学の枠内に収める方向で論点を整理してみよう．

米国物理学会の会誌に相当するPhysics Todayという月刊誌がある．ある分野での一定の進展があった時のレビュー論文はこういう雑誌の売り物である．また学会誌は会員の同人誌であるという（会員が少なかった創刊時の）趣旨から読者の声の投稿欄が一定の枠で用意されている．通常は4ページだが，量子力学に関係したレビュー論文が載ると意見を言いたい投稿が殺到し，数ヶ月してそれらを拡大した枠を設け掲載することがしばしばあった．多くの物理学者は量子力学の論争点に特化したような新展開を聞かされるたびに不満が募るのである．多くの物理学者は量子力学を使って各分野で支障なく毎日りっぱに仕事をしているから，それはすでに自分のものである．それに対して他人から「あなたが思っているようなものではないのですよ」と言われると，人生が否定されたように腹が立つのである．こういう「炎上」は量子力学談義にはつきものなのだ．

多種多様な「不満」の根拠や信条を整理してみても生産的ではないので，ここでは「素朴実在論」派を想定して彼らが主張する「越えられない一線」を列記すれば，次のような「踏み絵」が並ぶであろう．

1. 観測者と観測者が持つ知識とは無関係に実在がある．
2. 測定（観測）の概念が理論において基本の役割を果たさない．
3. 理論は，集団だけでなく，個々のシステムを記述できる．
4. 周辺外部から孤立した存在を想定できる．
5. 孤立したシステムに作用しても，離れたものに影響はない．
6. 客観的確率が存在する．

これらの踏み絵が提示される背景には「観測などしなくても，自然界はある法則性をもって実在する」という素朴実在論がある．そこには「人間が介入せずとも存在する法則性を発見するのが科学である」という科学という営み自体へのメタ理論が前提にある．すると，多くの人たちは「人間が介入せずとも存在する法則性を発見するのが科学である」というのは自明のことであって「素朴実在論」派などと一セクトの信条の様に表現されるのは「許せない」と怒りだすのである．Physics Todayでしばしば起こった「炎上」も科学者としてのアイデンティティ，自負，誇り，信条などの微妙な領域へ土足で踏み込まれたかのように身構えることで発生してきたと思う．

第 13 章
状態を制御する

従来，量子状態を外部から操作する発想が少なかった．外部からの作用は量子的なコヒーレンスを壊す，また不確定な擾乱により擾乱前の真の情報にはアクセスできない，そういうイメージがつきまとっていた．実際，ハイテク情報技術が進歩するまでは，現実にも量子状態の操作は制御不可能であったから．それが原理的な不可能性であると誤解されていたのである．

スピン，2 エネルギー・レベル，光の偏光，BS（ビーム・スプリッター）などの二状態物理系の制御について考える．

13.1 ビーム・スプリッター

13.1.1 ビーム・スプリッター (BS) の古典論

BS とは普通は一つのビームを二手に分けるものとして捉えられている，しかし，これを散逸のない完全に可逆的操作をする機器と考えるなら，一般には，二つのビームが入力して残る二つの別のビームを出力する機器と考えるべきである．一つのビームを二手に分ける過程の逆過程を考えると，入力の二つのビームの位相を厳密に調整しなければ，逆過程では一般には二つのビームとなって出力する．すなわち，四つのポートの何れかがゼロになるのは特殊な場合なのである．

そこで入力側に二つの入力 0 と 1，出力側に 2 と 3，都合四つのチャネルを考える．いま入力波を

$$E_0 = Ae^{i\phi_0},\ E_1 = Ae^{i\phi_1} \tag{13.1}$$

とする．スプリッターでは透過 (t) と反射 (r) は半々であり，さらに位相変化を伴うとする．それを考慮して出力は一般に次のように書ける．

$$E_2 = A\frac{1}{\sqrt{2}}[e^{i(\phi_0+\theta_{t2})} + e^{i(\phi_1+\theta_{r2})}], \tag{13.2}$$

$$E_3 = A\frac{1}{\sqrt{2}}[e^{i(\phi_0+\theta_{r3})} + e^{i(\phi_1+\theta_{t3})}]. \tag{13.3}$$

ここで θ_{ta}, θ_{ra} はチャネル a に抜ける場合の透過および反射に伴う位相変化である．

エネルギーの保存を要求すれば $E_0E_0^* + E_1E_1^* = E_2E_2^* + E_3E_3^*$ となり，これより

$$\cos(\phi_1 - \phi_0 + \theta_{r2} - \theta_{t2}) + \cos(\phi_1 - \phi_0 + \theta_{t3} - \theta_{r3}) = 0. \tag{13.4}$$

ここで公式 $\cos(A+B) + \cos(A-B) = 2\cos A\cos B$ を使えば上の条件は $\cos[\phi_1 - \phi_2 + (\theta_{r2} - \theta_{r3} + \theta_{t3} - \theta_{t2})/2]\cos[(\theta_{r2} + \theta_{r3} - \theta_{t2} - \theta_{t3})/2] = 0$ となるから，

$$\theta_{r2} + \theta_{r3} - \theta_{t2} - \theta_{t3} = \pm\pi \tag{13.5}$$

という関係が得られる．

ここでチャネル 2 と 3 が対称的であれば

$$\theta_r - \theta_t = \pm\pi/2 \tag{13.6}$$

である．このような対称的変換器と考えるとブラックボックスとして捉えたBSの機能は入力波の振幅 E_0, E_1 を出力波の振幅 E_2, E_3 に変換することである．

$$\begin{pmatrix} E_2 \\ E_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & \pm i \\ \pm i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix} e^{i\theta_t}. \tag{13.7}$$

“対称的” という要請をしなければ，この他にも多くの変換の可能性がある．例えば $\theta_{ta} = \theta_{r2} = 0$ であれば，$\theta_{r3} = \mp\pi$ が要請され，

$$\begin{pmatrix} E_2 \\ E_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix} \tag{13.8}$$

となる．

13.1.2 ビーム・スプリッターの量子論

量子論では振幅はオペレータであり，生成·消滅演算子 $a, a^\dagger$ で記述する．ビームスプリッターとは入力側のオペレータ a_0, a_1 を出力側のオペレータ a_2, a_3 に変換する装置であると見なせる．

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t' & r \\ r' & t \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}. \tag{13.9}$$

a_i, $a_i^\dagger$, $i = 0,1,2,3$ が生成・消滅演算子であるためには $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$ なる交換関係を満たさねばならない．ここで i, $j = 0,1$ に対してこの交換関係が成り立つとして，i, $j = 2,3$ に対しても成り立つためには，変換係数には次のよう

な制限が課せられる，

$$|r'| = |r|,\ |t'| = |t|,\ |r|^2 + |t|^2 = 1,\ r^* t' + r' t^* = 0,\ r^* t + r' t'^* = 0. \tag{13.10}$$

これは変換行列がユニタリー行列である条件であり，一般には (8.10) 式により次のように与えられる．

$$D(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\gamma}{2}} & -e^{-i\frac{\alpha}{2}}\sin\frac{\psi}{2}e^{i\frac{\gamma}{2}} \\ e^{i\frac{\alpha}{2}}\sin\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\gamma}{2}} & e^{i\frac{\alpha}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{i\frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix}. \tag{13.11}$$

ハーフミラーなら $\beta = \pi/2$ であり

$$D(\alpha,\pi/2,\gamma) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}. \tag{13.12}$$

例えば，“対称な場合” は $D(\pi/2,\pi/2,-\pi/2)$ である．

ここで，光子がチャネル 1 から入って 2 と 3 に等しく分かれていく状況を考えると，チャネル 0 は登場しない．だから $a_2 = ra_1$，$a_3 = ta_1$，$|t|^2 + |r|^2 = 1$ という関係が直観的には思い浮かぶ．しかしこれでは次のように交換関係は維持されない．

$$[a_2, a_2^\dagger] = |r|^2,\ [a_3, a_3^\dagger] = |t|^2,\ [a_2, a_3^\dagger] = rt^*,\ \text{など}. \tag{13.13}$$

このことはチャネル 0 の存在が，そのチャネルを使っていない（入力および出力に関与していない）にも拘らず，オペレータのあいだの関係式においては無視できないことを教えている．場の量子論では「光子がない」というのは，光子の数と言うオペレータの値がゼロという状態を指定することである．したがって，チャネル 0 からの「光子がない」を指示するオペレータ a_0 とその真空 $|0\rangle_0$ が必要なのである．

例えばチャネル 1 から一個の光子の入力する状態は，各チャネル i の真空状態を $|0\rangle_i$ と書けば，一個の状態は $|1\rangle_1 = a_1^\dagger|0\rangle_1$ である．従って入力状態は，チャネル 0 にゼロ個でチャネル 1 に一個と明示的に示して，$|\psi_{in}\rangle = |0\rangle_0|1\rangle_1 = a_1^\dagger|0\rangle_0|0\rangle_1$ と表せる．ここで対称的で $r = i$ の場合の変換を用いれば $a_1 = (-ia_2 + a_3)/\sqrt{2}$.

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{in} \to |\psi\rangle_{out} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_2^\dagger + a_3^\dagger)|0\rangle_2|0\rangle_3 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[i|1\rangle_2|0\rangle_3 + |0\rangle_2|1\rangle_3]. \end{aligned} \tag{13.14}$$

ちなみに，チャネル 0 とチャネル 1 の両方から光子一個を入力した場合を考えると

$$|\psi\rangle_{in} = |1\rangle_0|1\rangle_1 \to |\psi\rangle_{out} = \frac{1}{\sqrt{2}}i[|2\rangle_2|0\rangle_3 + |0\rangle_2|2\rangle_3] \tag{13.15}$$

となり，$|1\rangle_2|1\rangle_3$ 状態は現れないことが分かる．これは，[ともに通過]+[ともに反射]=0 のような逆位相での干渉による効果である．

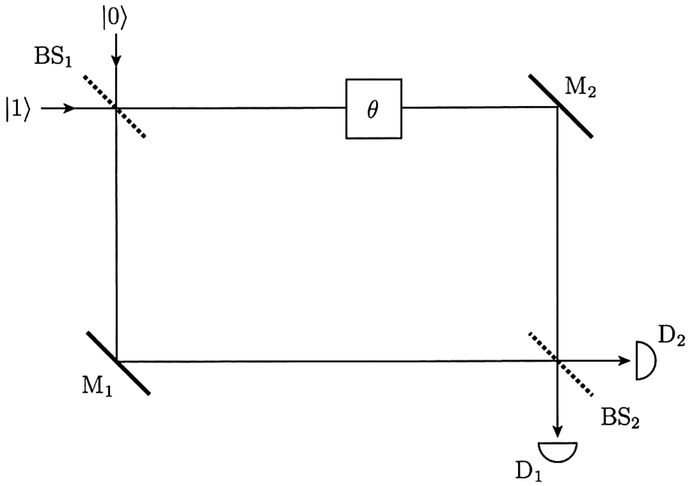


図 13.1　マッハ–ツェンダー干渉計.

13.1.3　マッハ–ツェンダー干渉計

二つのビームスプリッターと二つの反射鏡を長方形に配置したのがマッハ–ツェンダー (Mach–Zehnder) 干渉計 (図 13.1) である．前に見た様にチャネル 1 から一個の光子がビームスプリッターを通過後の状態は $|\psi\rangle_{out}$ である．ここでチャネル 3 上にそこに光子がある時に位相を θ だけ変える位相変換器を挿入する．これは例えば長さ ΔL の屈折率 n の物体を通過させればよい．$(e^{ik(L-\Delta L)+ik'\Delta L} = e^{ikL}e^{i(k'-k)\Delta L} = e^{ikl}e^{i\phi},\ \phi = (n-1)k\Delta L,\ \omega = ck = (c/n)k'.)$

オペレータで強いて書けば $\exp[i\theta\hat{n}_3]$ と書ける．ここで $\hat{n}_3$ はチャネル 3 上の光子数のオペレータである．この位相変換器を過ぎた後の状態 $|\psi\rangle_{out2}$ は

$$|\psi\rangle_{out1} \to |\psi\rangle_{out2} = \frac{1}{\sqrt{2}}[i|1\rangle_2|0\rangle_3 + e^{i\theta}|0\rangle_2|1\rangle_3]. \tag{13.16}$$

この状態で第二のビームスプリッターを通過するわけであるが，これによって各々次のように変換される．

$$|1\rangle_2|0\rangle_3 \to \frac{1}{\sqrt{2}}[i|1\rangle_4|0\rangle_5 + |0\rangle_4|1\rangle_5], \tag{13.17}$$

$$|0\rangle_2|1\rangle_3 \to \frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle_4|0\rangle_5 + i|0\rangle_4|1\rangle_5]. \tag{13.18}$$

これらの変換を $|\psi\rangle_{out2}$ の各項に施せば，通過後の状態は

$$|\psi\rangle_{out3} = \frac{1}{2}[(e^{i\theta} - 1)|1\rangle_4|0\rangle_5 + i(e^{i\theta} + 1)|0\rangle_4|1\rangle_5]. \tag{13.19}$$

この状態を，図 13.1 のように，スプリッター斜面下に置いた光子カウンターを D_1，横に置いたのを D_2 とすれば，検出の確率 Pr は各々次のように計算できる．

$$\Pr(\mathrm{D}_1) = {}_{out3}\langle\psi|(|1\rangle\langle 1|)_4(|0\rangle\langle 0|)_5|\psi\rangle_{out3} = \frac{1}{2}(1-\cos\theta), \tag{13.20}$$

$$\Pr(\mathrm{D}_2) = {}_{out3}\langle\psi|(|0\rangle\langle 0|)_4(|1\rangle\langle 1|)_5|\psi\rangle_{out3} = \frac{1}{2}(1+\cos\theta). \tag{13.21}$$

位相変換器を挿入しない $\theta = 0$ の場合には，光子は片方にだけ出て行くことが分かる．これは一つのチャネルから入力したことの時間的逆過程が実現しているのである．

13.1.4 BS のハミルトニアン

BS がオペレータや状態を変換していく様子を見てきたが，この記述では物理現象はハミルトニアンによる時間的変化であるということが見えていない．現実には各チャネルのオペレータ a_i の間の相互作用が半透明幕の薄膜のところで起こっているのである．ここではこの相互作用のハミルトニアン H_{int} を上述の変換則から逆算してみる．すなわち，$a_0 = a(t)$ がユニタリー変換 $U(\Delta t) = \exp[-i\Delta t H_{int}/\hbar]$ によって $a_2 = a(t+\Delta t)$ に時間変化するという見方を回復してみる，

ここで唐突であるがユニタリー変換

$$U = \exp\left[i\frac{\pi}{4}(a_0^\dagger a_1 + a_0 a_1^\dagger)\right] \tag{13.22}$$

によって，対称 BS に要請されている機能

$$a_2 = U^\dagger a_0 U = \cos\frac{\pi}{4}a_0 + i\sin\frac{\pi}{4}a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_0 + ia_1), \tag{13.23}$$

$$a_3 = U^\dagger a_1 U = \cos\frac{\pi}{4}a_1 + i\sin\frac{\pi}{4}a_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + ia_0), \tag{13.24}$$

が実現されていることが分かる．したがって，$H_{int} = C(a_0^\dagger a_1 + a_0 a_1^\dagger)$ と置けば，

$$-\frac{\Delta t}{\hbar}C = \frac{\pi}{4}. \tag{13.25}$$

この計算には Baker–Hausdorf 公式

$$e^{i\lambda A}Be^{-i\lambda A} = B + i\lambda[A,B] + \frac{(i\lambda)^2}{2!}[A,[A,B]] + \cdots \tag{13.26}$$

を用いる．ここで $A = a_0^\dagger a_1 + a_0 a_1^\dagger$，$A = A^\dagger$，$B = a_0$ とすれば $[A,a_0] = -a_1$，$[A,a_1] = -a_0$，$[A,[A,a_0]] = a_0, \cdots$ などである．

13.2 Rabi 振動

13.2.1 電磁場との相互作用

電磁ポテンシャル，$\boldsymbol{A}, U$，の中での荷電粒子のハミルトニアンは次のように

与えられる．

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}[\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A}]^2 - eU + V(r). \tag{13.27}$$

この一般的な形は電磁ポテンシャルが持つゲージ変換に対する不定性を用いて書き換えることができる．ここでゲージ変換の不定性とは

$$U \to U - \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} + \nabla \chi \tag{13.28}$$

なる変換に対して，電場・磁場

$$\boldsymbol{E} = -\nabla U - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \ \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{13.29}$$

が変化しないということである．$\chi(x, y, z, t)$ は任意関数である．すなわち，同じ電場・磁場を与える電磁ポテンシャルは一義的に決まってはいないのである．

またシュレディンガーの波動関数にも位相変換 $(\hat{R})$ の不定性があることを思い起こしてみる．$\Psi' = \hat{R}\Psi$ なる波動関数 Ψ' が $i\hbar\frac{\partial \Psi'}{\partial t} = H'\Psi'$ を満たすとすれば，ハミルトニアンは次のように変換されることが分かる．

$$\hat{H}' = \hat{R}H\hat{R}^\dagger + i\hbar\frac{\partial \hat{R}}{\partial t}\hat{R}^\dagger. \tag{13.30}$$

ここで $\hat{R} = \exp(-ie\chi/\hbar)$ にとれば，H' はゲージ変換された電磁ポテンシャルを用いた表式になる．

このように電磁ポテンシャルのゲージ変換と波動関数の位相変換は関連している．ここで古典力学と量子力学で電磁相互作用を担う変数の取り方が違うことに注意する．古典力学では電場・磁場が登場し，量子力学では電磁ポテンシャルが登場して電場・磁場はハミルトニアンには現れない．だから，ゲージ変換しても「電場・磁場が同じだから，力は同じである」という言い方は古典力学では正しいが，量子力学では成立しない．量子力学では，電磁ポテンシャルのゲージ変換に伴うハミルトニアンの変更は波動関数の位相変換に組み込むことができる，ということで物理的同一性が保たれている（9.1.2 節も参照）．

ゲージ変換の不定性を利用して，ここではクーロンゲージと呼ばれる $U = 0$ という電磁ポテンシャルを取ることにする．このゲージでは $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$, $[\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}]\boldsymbol{A} = 0$ であり，縦波の電磁波を記述するのに都合の良いゲージである．そしてハミルトニアンは $\hat{H} = \frac{1}{2m}[\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{A}]^2 + V$ となり，ゲージ変換を行えば

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}[\hat{\boldsymbol{p}} + e(\boldsymbol{A} + \nabla\chi)]^2 + e\frac{\partial \chi}{\partial t} + V \tag{13.31}$$

となる．ここで電磁波 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)} + \mathrm{C.C.}$ の波長 $\lambda = 2\pi/k$ に比べて，荷電粒子の運動範囲が十分に小さければ，その範囲内で電磁波は空間的に一様であると近似できるから，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \simeq \boldsymbol{A}(t)$ である．そこでいまゲージ変換の関数を $\nabla \cdot \chi(\boldsymbol{r}, t) = -\boldsymbol{A}(t)$ にとれば，$\chi(\boldsymbol{r}, t) = -\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{A}(t)$ であるから，

$$\boldsymbol{A} + \nabla\chi = 0, \qquad \frac{\partial\chi}{\partial t}(\boldsymbol{r}, t) = -\boldsymbol{r}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} = -\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{E}(t). \tag{13.32}$$

したがってハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 + V + e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{E}(t). \tag{13.33}$$

ここで原子の場合は $\boldsymbol{d} = -e\boldsymbol{r}$ は電気二重極 (dipole) を表し，$\boldsymbol{r}$ は一般的にはオペレータである．このようにして，$\hat{H}_0 = \boldsymbol{p}^2/2m + V$ で記述される粒子系に対して，そのサイズよりも十分長い波長の電磁波を入射したときの相互作用ハミルトニアン $\hat{H}_{int}$ は次のようになる．

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}, \qquad \hat{H}_{int} = -\hat{\boldsymbol{d}}\ \cdot\ \boldsymbol{E}(t). \tag{13.34}$$

13.2.2　二状態間の振動

$\hat{H}_0$ で記述される粒子系のエネルギー固有状態が二状態で，これらの状態と定振動数の電場 $\boldsymbol{E}(t) = \boldsymbol{E}_0\cos\omega t$ とが電気二重極で相互作用をするモデルを考える．相互作用ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{int} = -\hat{\boldsymbol{d}}\ \cdot\boldsymbol{E}_0\cos\omega t = \hat{V}_0\cos\omega t, \quad \hat{V}_0 = -\hat{\boldsymbol{d}}\ \cdot\boldsymbol{E}(t) \tag{13.35}$$

となり，シュレディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = [\hat{H}_0 + \hat{V}_0\cos\omega t]|\Psi\rangle \tag{13.36}$$

である．7.2.3 節でみたように，$|\Psi\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi\rangle$ で定義される $|\psi\rangle$ を用いると，それに対する方程式は次のようになる．

$$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}_0 e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi\rangle. \tag{13.37}$$

ここで二状態の基底ベクトルを $|g\rangle$, $|e\rangle$ と書けば，一般の状態をこの二つの状態の重なりとして $|\psi(t)\rangle = C_g(t)|g\rangle + C_e(t)|e\rangle$ で書き表せる．ここで添字 g は基底状態 (ground state)，e は励起状態 (excited state) は表す．これを上式に代入すると

$$i\dot{C}_g|g\rangle + i\dot{C}_e|e\rangle = C_g e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}_0 e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|g\rangle + C_e e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}_0 e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|e\rangle. \tag{13.38}$$

この数式に左から $\langle g|$, $\langle e|$ とのスカラー積を取ると次の関係が得られる．

$$\dot{C}_g = -iv\cos\omega t e^{-i\omega_0 t}C_e, \quad \dot{C}_e = -iv\cos\omega t e^{i\omega_0 t}C_e. \tag{13.39}$$

ここで

$$\hat{H}_0|g\rangle = E_g|g\rangle,\ \hat{H}_0|e\rangle = E_e|e\rangle,\ \hbar\omega_0 = E_e - E_g, \tag{13.40}$$

さらに次のような状態の遷移を取り上げている．

$$\langle e|g\rangle = 0,\ \langle e|\hat{V}_0|g\rangle = \hbar v,\ \langle e|\hat{V}_0|e\rangle = \langle g|\hat{V}_0|g\rangle = 0. \tag{13.41}$$

$\cos\omega t = (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})/2$ であるから，$\dot{C}_g, \dot{C}_e$ を決める (13.39) 式の右辺には $e^{i(\omega-\omega_0)t}$ と $e^{i(\omega+\omega_0)t}$ で振動する項が現れるが，$\omega \gg |\omega_0 - \omega|$ の状況では，$T \sim 2\pi/|\omega_0 - \omega|$ の時間スケールでみれば $\overline{e^{-i(\omega+\omega_0)t}} \approx 0$ のように平均してゼロになるという近似を行うことができる．このような近似は RWA(Rotating Wave Approximation) と呼ばれている．

この近似の下では上式は次のようになる．

$$\dot{C}_g = -\frac{i}{2} v \exp[i(\omega-\omega_0)t] C_e,\ \ \dot{C}_e = -\frac{i}{2} v \exp[-i(\omega-\omega_0)t] C_g. \tag{13.42}$$

二つ方程式から $C_g(t)$ を消去すると

$$\ddot{C}_e + i(\omega - \omega_0)\dot{C}_e + \frac{v^2}{4} C_e = 0. \tag{13.43}$$

この微分方程式の $C_e(t) = e^{i\Omega t}$ の型の解となる Ω を求めると，次の二つの固有振動数が求まる．

$$\Omega_\pm = \frac{1}{2}[(\omega_0 - \omega) \pm \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + v^2}]. \tag{13.44}$$

したがって，一般の解は次のように表せる．

$$C_e = A_+ e^{i\Omega_+ t} + A_- e^{i\Omega_- t}. \tag{13.45}$$

ここで $C_g(0) = 1, C_e(0) = 0$ なる初期条件を課すと，

$$A_\pm = \frac{v}{2\Omega_R},\ \Delta = \omega_0 - \omega, \Omega_R = \sqrt{\Delta^2 + v^2} \tag{13.46}$$

であり，次のように振幅の変化が得られる．

$$C_g(t) = e^{i\Delta t/2}\left[\cos(\Omega_R t/2) - i\frac{\Delta}{\Omega_R}\sin(\Omega_R t/2)\right], \tag{13.47}$$

$$C_e(t) = i\frac{v}{\Omega_R} e^{i\Delta t/2} \sin(\Omega_R t/2). \tag{13.48}$$

なお状態ベクトルは $|\Psi\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi\rangle$ であったから，全体の位相を無視して，

$$|\Psi\rangle = C_g(t)|g\rangle + e^{-i\omega_0 t} C_e(t)|e\rangle \tag{13.49}$$

と与えられる．

さらに励起状態の確率は

$$P_e(t) = |C_e(t)|^2 = \frac{v^2}{\Omega_R^2}\sin^2(\Omega_R t/2) \tag{13.50}$$

で与えられ，Rabi 周期 $T_R = 2\pi/\Omega_R$ で振動する．最大の確率は $\frac{v^2}{\Omega_R^2}$ で与えられ，$\Delta = 0$ の共鳴条件に近ければ大きくなる．

共鳴条件の場合，$\Omega_R = v$ であり，また二状態の確率の差は

$$W(t) = P_e(t) - P(t)_g = \sin^2\left(\frac{vt}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{vt}{2}\right) = -\cos(vt) \quad (13.51)$$

で与えられる．$t = 0$ から $t = \pi/v$ まで外部から放射を照射すると $W(0) = -1$ から $W(\pi/v) = 1$ へと完全に反転する．このような操作は $\pi-$ パルスと呼ばれる．また照射時間が半分であれば

$$C_e(\pi/2v) = \frac{i}{\sqrt{2}}, C(\pi/2v) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (13.52)$$

だから，この $\pi/2-$ パルスでは

$$|\psi(\pi/2v)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + i|e\rangle) \quad (13.53)$$

という状態を作ることができる．

13.2.3 キャビティー QED

前述の議論は，決まった時間の放射を照射して，二状態の原子の状態を制御することであった．次にここでは，放射が充満しているキャビティー (cavity) の中を二状態の原子が通過するという状況を考える．今度は，原子の状態変化はキャビティー内の光子数状態 ($|n\rangle$) の変化と連動して考えなければならない．すなわち

$$\text{状態 } |e\rangle|n\rangle \quad \text{と} \quad \text{状態 } |g\rangle|n+1\rangle \quad (13.54)$$

の間の遷移である．系全体のハミルトニアンは原子 H_A と放射 H_F とその間の相互作用 H_{int} とから成り，次のように表される．

$$H = H_A + H_F + H_{int}. \quad (13.55)$$

さらに二状態原子の遷移という過程だけを取り扱うモデルを考えれば次のようになる．

$$H_A = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_3,\ H_F = \hbar\omega a^\dagger a,\ H_{int} = \hbar v(\sigma_+ + \sigma_-)(a + a^\dagger). \quad (13.56)$$

前節と同様の RWA の近似を行えば，相互作用は前節の $\hbar v$ から

$$\langle n+1|\langle g|H_{int}|e\rangle|n\rangle = \hbar v\sqrt{n+1} \quad (13.57)$$

と変わるから，$\Omega_R = \sqrt{\Delta + v^2(n+1)}$ と変更される．しかし変更された振動数で Rabi 振動は同じように起こる．

マイクロ波のキャビティーと Rydberg 原子

このモデルに相当する実際の実験は放射としてはマイクロ波が用いられる．一方，大きな振幅の Rabi 振動を実現するには原子に状態のエネルギー差 $\hbar\omega_0$ が

放射系の光子のエネルギー $\hbar\omega$ に近くなければならない．ところが原子のエネルギー準位の間隔はマイクロ波光子のエネルギーよりは通常はるかに大きい．しかし，この間隔は主量子数 n が大きい高励起状態では小さくなっていく．いまエネルギー準位を $E_n = -R/n^2$ と書けば，$n \gg 1$ の近似では，$\Delta E_n \sim (2/n)E_n$ である．例えば水素原子では，$R = -E_1 = 13.6ev$ だから，これをマイクロ波の間隔に下げるには $n \sim 1000$ ぐらいの準位に励起しておけばよい．このような高励起の原子は Rydberg 原子と呼ばれる．

13.3 Stern–Gerlach 実験

空間的に強度が僅かに変化する磁場のスポット的な領域に電子ビームを入射すると，電子のスピン状態によって電子ビームの軌道を選り分けることができる．電子の磁気能率（$\mu = \frac{g}{2}\mu_B$，$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = \frac{e}{m_e}J$,（$g = 2.002\cdots$））による磁場との相互作用のハミルトニアンは

$$H = \boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}.$$

ここで z-軸方向を向いた磁場の領域を電子が x 軸方向に通過するとする．通過時間を Δt として，この間の時間変化のオペレータは $U = e^{-i\Delta tH/\hbar}$ である．この磁場とスピンの作用によって電子は z 軸方向の運動量を新たに得る．

$$p_z(t+\Delta t) = Up_z(t)U^\dagger = \left(1 - i\Delta t\frac{H}{\hbar}\right)p_z(t)\left(1 + i\Delta t\frac{H}{\hbar}\right)$$

$$= p_z(t) + i\frac{\Delta t}{\hbar}(p_zH - Hp_z). \tag{13.58}$$

ここで

$$p_zH - Hp_z = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dz}H + Hp_z - Hp_z = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dz}H \tag{13.59}$$

であるから，$J = (\hbar/2)\sigma_z$ を使って

$$\Delta p_z = p_z(t+\Delta t) - p_z(t) = \left(\frac{g}{2}\frac{eB}{m}\Delta t\right)\frac{\hbar}{B}\frac{dB}{dz}\sigma_z. \tag{13.60}$$

すなわち，$\Delta p_z = \pm\left(\frac{g}{2}\frac{eB}{m}\Delta t\right)\frac{\hbar}{B}\frac{dB}{dz} = \pm\Delta P.$ (13.61)

電子のスポット通過前の状態が $|\psi\rangle = N(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|p_z = 0\rangle$ であれば

$$U|\psi\rangle = N(\alpha|0\rangle|\Delta P\rangle + \beta|1\rangle|-\Delta P\rangle) \tag{13.62}$$

のようにスピン状態に運動量がエンタングルするのである（(12.16) 式参照）．

第 14 章 実験量子力学

量子力学創造当時にはボーア・アインシュタイン論争のように，量子力学の問題点の議論を深めるために多くの思考実験が論議された．当時は実験のテクノロジーが未発達であったために思考上の実験に止まらざるを得なかったのである．しかし，現在，量子力学自体が創造した情報処理も含むテクノロジーの発達で多くの実験が可能になっている．

14.1 二重スリットによるヤング干渉縞

第 2 章で見たようにヤングが 19 世紀の初めに発見した二重スリットによる干渉縞は光の波動説を確立した，しかし光電効果や電子線の干渉の実験を説明するために，アインシュタインの光の粒子説とド・ブロイの電子の波動説が登場し，素粒子は粒子・波動の二重性を持つことが明らかになった．この二重性は場の量子力学で理解されることを光子の場合について第 2 章でみた．さらに，干渉縞は一個の粒子が何れかのスリットを通過した二つの状態の重なりにより生ずることを見た．光子一個はスリットを通過して背後のスクリーンのある位置をヒットするに過ぎない．しかし，多数の光子による多数回のヒット実験を繰り返した測定データを各位置へのヒット回数のヒストグラムとして描くと，そのグラフが干渉縞の形となるのである．

現在は，光でも電子でも，一個づつスリットを通過させることができる．各粒子はバラバラの位置に到着するが，数多くのヒット位置の情報を集積すると干渉縞模様になることが直接に示される．ヤングの干渉実験の場合には，光源は熱放射であるから，無数の原子からバラバラに（コヒーレントでなく）光子をスリットに送り込む実験を繰り返している．干渉縞を写真乾板や目視でみる場合でも，数多くのヒット実験の集積データを見ているのである．視覚の時間分解能は約 0.03 秒とされている．この間に数多くの光子が到着する実験なので，目にするのは瞬間像ではなく，時間的に集積された像が見られるのである．量

子力学は多数回の集積データの振る舞いを決めている確率を与える．(0.03 秒という時間分解能の粗さがあるからディスプレイ機器や動画が可能なのである．もし視覚の時間分解能がもう百万分の一と短かければ，ディスプレイ画面では一見無秩序に次々とどこかが瞬時にスポット的に光るだけである.)

前に見たように干渉縞を見せる確率は古典的に両立不可能な二つの状態の重なりが必要であった．コペンハーゲン解釈でいう「波動関数の収縮」はスクリーンをヒットする際におこるのである．そこまでは「重なった状態」でなければならない．だから，もし一個の粒子が何れかのスリットを通過したかをチェックできる実験のデータなら干渉縞は現れない．どのような測定でデータを取得するかの意図によって実験データが示す振る舞いは違うのである．

14.2 二原子による散乱光の干渉

“いずれのスリットを通過の識別” のオン・オフを制御できる実験が可能になっている．図 14.1 のケース A のように “スリット” の代わりに二つの原子を置き，それらに同じ様に作用する平面波を送り，その散乱光をスクリーン D 上で測定するのである．

ケース A では送り込まれたエネルギー l_1 の光子は原子 1 と原子 2 に同時に散乱されて D 上に干渉縞を描く．次に，ケース B では l_1 の光子で励起されたレベルの性質として別の下位のレベル b に脱励起するような原子を考える．スクリーン上にはこの脱励起で放出される光子 γ が到達してヒットする．このケースでは何れかの原子に残存エネルギーという痕跡を残しているから，“いずれのスリットを通過の識別” が可能（オン）になる．したがって，光子 γ のヒット回数には干渉縞は現れない．均等に何れかを通過したイヴェントの集積データとなるのでヒストグラムは回折効果で広がった一つ山の分布となる．

ケース C ではレベル b にある証拠を消してしまうために，エネルギー l_1 の

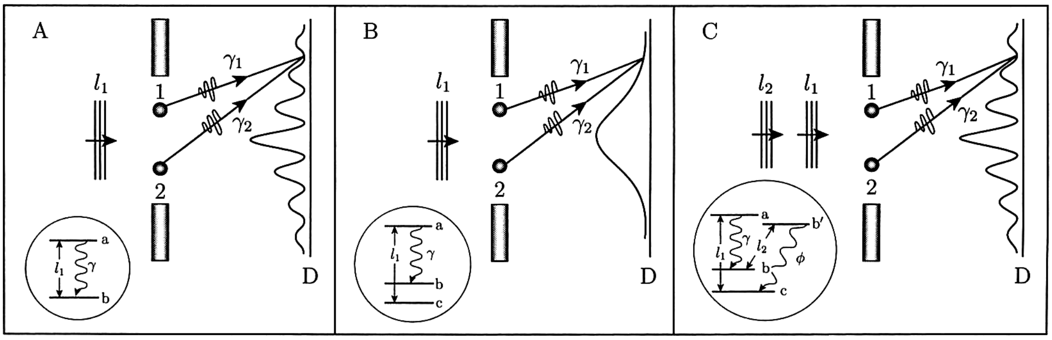


図 14.1　二原子による散乱と原子のレベル構造．(Yoon-Ho Kim *et al.*, Phys. Rev. Lett. 84, 1–5 (2000) より.)

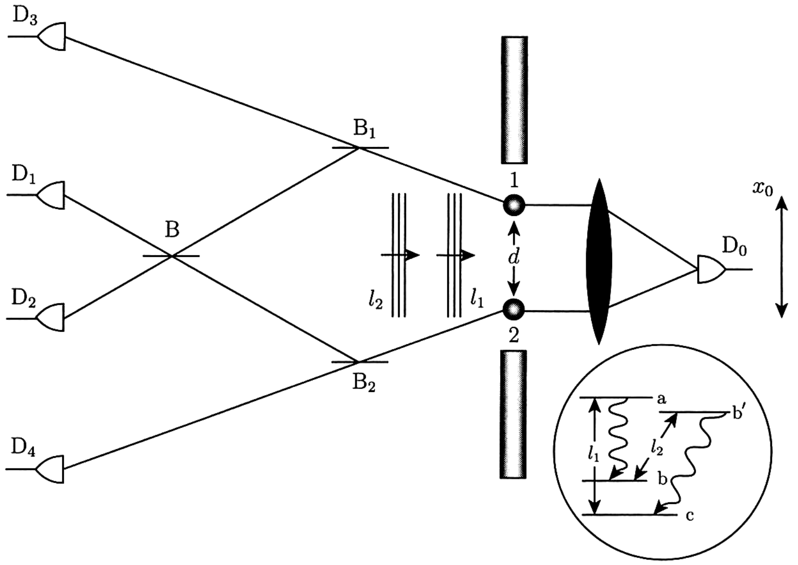


図 14.2　D_0 と D_1-D_4 の何れかとのコインシデンス測定（同一の原子現象であることを光子検出時間で確認する測定）.（Yoon-Ho Kim *et al.*, Phys. Rev. Lett. 84, 1–5 (2000) より.）

他にエネルギー l_2 の光子を送って他のレベル b' を経由して最終的に基底レベルに移す．すると干渉縞が現れることが実験で確かめられている．l_2 光子はいわば証拠隠滅の"量子消しゴム"の役目をしている．

次に"量子消しゴム"光子で励起された b' レベルから基底レベルへの遷移で放出される光子を検出する測定器 D_1-D_4 を図 14.2 の左方に描いたように配置する．ここで放出源が原子 1 か原子 2 かが分かる検出（D_3 と D_4）と分からない検出（D_1 と D_2）があり，前者では干渉縞は現れず，後者では現れる：(1) D_1 と D_0 のコインシデンス測定のデータを使うと，D_1 は量子消しゴムの痕跡を突き止めないので，干渉縞が現れる．(2) D_2 と D_0 のコインシデンス測定のデータを使うと，(1) の場合と同様に干渉縞は現れるが B での通過と反射での位相差が生ずる．(3) D_3 と D_0 のコインシデンス測定のデータを使うと，原子 1 による散乱が確認されるので，干渉縞は現れない．(4) D_4 と D_0 のコインシデンス測定のデータを使うと，原子 2 による散乱が確認されるので干渉縞は現れない．

14.3　ベル不等式の検証と隠れた変数説

ミクロには無数の力学変数があるのに，統計力学ではこれらの変数について平均したマクロな物理量の間の法則性を導く．このためマクロな物理量には確率過程に従う揺らぎが伴う．これの類推で考えると量子力学の確率記述の背後

にも実は“隠れた変数”があり，それらについて平均した量を扱っているので確率が登場するのであるという主張があった．この“隠れた変数”説を実験的に検証可能にするものとして提出されたものがベルの不等式である．

ここでは次のような実験を想定する．ある定められた空間方向のもとで二状態を取るものを考える．具体例としてはスピン 1/2 の粒子や偏りを持つ光子がある．スピンや偏りが一般の方向を向いた状態は，各々の二状態の重なった状態で表される．次に二状態を取る系（一個のスピン粒子や光子）二個の複合系を考える．そしてある指定された状態にある複合系を多数用意できるとする．次にこの複合系の各一体系の状態を引き離して別々に測定して，測定結果の二体間での相関を考察するのである．この相関が“隠れた変数”説と量子力学で違っており，実験により判定できるのである．

14.3.1 隠れた変数 (hidden variables) とベル不等式

具体的にイメージし易くするために，スピン上下方向二状態 ($|0\rangle$ および $|1\rangle$) を取る A 粒子と B 粒子の複合系を考える．量子力学では例えば次のようなシングレット状態の複合系を設定できる．

$$|\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|1\rangle_B - |1\rangle_A|0\rangle_B). \tag{14.1}$$

二つの粒子のスピンを「上下」とは異なった方向（A 粒子については $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{a}'$, B 粒子については $\boldsymbol{b}$ と $\boldsymbol{b}'$）で測定する．すなわち $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}'$, $\boldsymbol{a}'$ と $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{a}'$ と $\boldsymbol{b}'$ の四種の測定をする．たとえスピンを傾いて測定しても，状態は二値だから測定結果は $A(\boldsymbol{a}) = \pm 1, B(\boldsymbol{b}) = \pm 1, \cdots$ のようになる．角度に応じて ± 1 の出現確率が異なるのである．いま $A(\boldsymbol{a}) = \alpha_1$, $A(\boldsymbol{a}') = \alpha_2$, $B(\boldsymbol{b}) = \beta_1$, $B(\boldsymbol{b}') = \beta_2$ と置いて，

$$S = \alpha_1\beta_1 + \alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1 - \alpha_2\beta_2 \tag{14.2}$$

なる相関関数を考える．四つの測定量 $(\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2)$ が二値 (± 1) しか取らないのであるから全部で 16 個のケースしかないが，何れの場合でも $S = 2$ または -2 であることが確かめられる．(これは $(\alpha_1\beta_1)(\alpha_1\beta_2)(\alpha_2\beta_1) = \alpha_1^2\beta_1^2\alpha_2\beta_2 = \alpha_2\beta_2$ であることから証明できる.) しかし多数回実験での平均値 $\langle S\rangle$ については何も言えない．

まず $\langle S\rangle$ を“隠れた変数”の立場で計算してみる．“隠れた変数”λ があり，測定値は 2 粒子に共有される λ で決定されていると考える．すなわち

$$A(\boldsymbol{a}, \lambda) = \pm 1,\ B(\boldsymbol{b}, \lambda) = \pm 1, \quad \cdots \tag{14.3}$$

のように確定しているとする．ただし，実験ではこの λ は測定してないので，

$$E(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = \int A(\boldsymbol{a}, \lambda)B(\boldsymbol{b}, \lambda)\rho(\lambda)d\lambda, \cdots \tag{14.4}$$

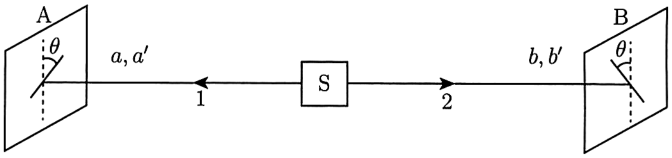


図 14.3　ベルが考案した EPR 実験：源 S で発生した絡み合った状態の二つの粒子 1, 2 を左右に走らせ，離れた地点で観測する．観測の際，検出器の検出角度を左では θ_a, $\theta_{a'}$, 右では θ_b, $\theta_{b'}$ にとる．したがって四つの角度の組み合わせで検出実験をする．

のような統計平均が測定されている．ここで $\rho(\lambda)$ は λ の出現確率分布である．したがって

$$S(\lambda) = [A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{b},\lambda) + A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{b}',\lambda) + A(\boldsymbol{a}',\lambda)B(\boldsymbol{b},\lambda) - A(\boldsymbol{a}',\lambda)B(\boldsymbol{b}',\lambda)] \quad (14.5)$$

を用いれば

$$\langle S\rangle = \int \rho(\lambda)d\lambda S(\lambda) \quad (14.6)$$

と書ける．同じ λ 状態での四種類の測定という立場に立つと [　　] 内の量には相互関係がつく．結果は 16 個のケース $(a = 1, \cdots, 16)$ の何れかになるのであるが，何れの場合も $S_a = \pm 2$ であり，各ケースの出現回数 N_a を支配しているのが λ であると考える．こうして

$$\langle S\rangle = \frac{\sum_{a=1}^{16} N_a S_a}{\sum_{a=1}^{16} N_a}, \quad S_a = \pm 2 \quad (14.7)$$

のように書けるが，一般には $-2 \leq \langle S\rangle \leq 2$ となる．あるいは $|\langle S\rangle| \leq 2$ である．これをベルの不等式という．各ケースの出現回数が均等なら $\langle S\rangle = 0$ である．またこの不等式は複合系の状態の如何に関わらず成立するものである．

14.3.2　量子力学による $\langle S\rangle$ の計算

この計算を先述のシングレット状態 $|\psi_s\rangle$ の複合系について行ってみる．xz 面で z 軸から θ 傾いたスピン演算子は $\sigma(\theta) = \cos\theta\sigma_z + \sin\theta\sigma_x$ であった．$E(\alpha,\beta) = \langle\psi_s|\sigma_A(\alpha)\sigma_B(\beta)|\psi_s\rangle$ のように書けば，

$$\langle S\rangle = E(\alpha,\beta) + E(\alpha,\beta') + E(\alpha',\beta) - E(\alpha',\beta') \quad (14.8)$$

である．各項の次のように計算できる（添字 A,B は省略）．

$$E(\alpha,\beta) = \langle\psi_s|\frac{1}{\sqrt{2}}[\sigma(\alpha)|0\rangle\sigma(\beta)|1\rangle - \sigma(\alpha)|1\rangle\sigma(\beta)|0\rangle]$$
$$= \frac{1}{2}[\langle 0|\sigma(\alpha)|0\rangle\langle 1|\sigma(\beta)|1\rangle - \langle 0|\sigma(\alpha)|1\rangle\langle 1|\sigma(\beta)|0\rangle - \langle 1|\sigma(\alpha)|0\rangle\langle 0|\sigma(\beta)|1\rangle + \langle 1|\sigma(\alpha)|1\rangle\langle 0|\sigma(\beta)|0\rangle]$$

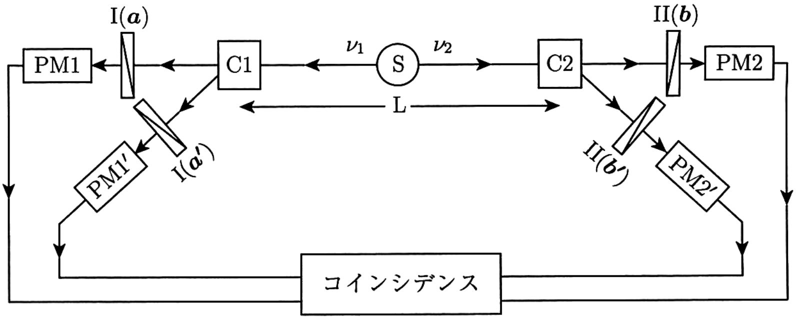


図 14.4　アスペ実験：偏光状態が互いにエンタングルした二つの光子を S で発生させて左右に導き，C1,C2 の光学スイッチで二手に振り分ける．各々の角度の偏光版を通して検出器 PM で光子を検出．コインシデンス（時刻の一致）を取ることで四つの角度の組み合わせのデータが得られる．

$$= \frac{1}{2}[-\cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\sin\beta - \sin\alpha\sin\beta - \cos\beta\cos\alpha]$$
$$= -\cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\sin\beta = -\cos(\alpha-\beta). \tag{14.9}$$

したがって

$$\langle S\rangle = -\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha-\beta') - \cos(\alpha'-\beta) + \cos(\alpha'-\beta'). \tag{14.10}$$

この量子力学で計算される $|\langle S\rangle|$ は，次の例のように，2 より大きい場合があり，ベル不等式を一般には満たしていない．

例 1　$\alpha=\beta=0$, $\alpha'=\phi$, $\beta'=-\phi$ では，$\langle S\rangle = -1-2\cos\phi+\cos 2\phi$. 例えば $\phi=\pi/4$ で $\langle S\rangle = -1-\sqrt{2} < -2$. また $\cos 2\phi = 2\cos^2\phi - 1$ だから，$\langle S\rangle = -2-2\cos\phi+2\cos^2\phi = 2(\cos\phi-\frac{1}{2})^2-\frac{5}{2}$ であり，$0<\phi<\pi/2$ で $|\langle S\rangle| > 2$.

例 2　$\alpha=0$, $\beta=\pi/4$, $\alpha'=\pi/2$, $\beta'=-\pi/4$. $\langle S\rangle = -\cos(\pi/4) - \cos(\pi/4) - \cos(\pi/4) - \cos(\pi/4) = -4/\sqrt{2} = -2\sqrt{2} < -2$.

14.3.3　実験による判定

如何なる複合系でも “隠れた変数” 説では $|\langle S\rangle| \leq 2$ を結論づけるが，量子力学ではこれを破る複合系がある．この対決を実験で直接判定したのがアスペ等である．この実験での二状態は光子の偏りである．図のように偏り状態がシングレット状態にエンタングルした二個の光子を左右に導き，光学スイッチで測定方向の異なる検出器にランダムに導く．この実験で $|\langle S\rangle| \geq 2$ となる場合があることが結論された．また原子炉からの中性子のスピン系での実験でも同じ結論が得られている．

14.4 測定に依存しない実在のパラドックス

スピン状態がシングレットの2体複合系を考える．σ_{1x}とσ_{2x}は反対符号．σ_{1y}とσ_{2y}についても同様．また別粒子だから$[\sigma_{1x}, \sigma_{2y}] = 0$, $[\sigma_{1x}\sigma_{2y}, \sigma_{1y}\sigma_{2x}] = (i\sigma_{1z})(-i\sigma_{2z}) - (-i\sigma_{1z})(i\sigma_{2z}) = 0$であり，$\sigma_{1x}\sigma_{2y}$と$\sigma_{1y}\sigma_{2x}$は同時測定可能．$m_{1x}m_{2y}, m_{1y}m_{2x}$などは測定で決まる．ここで“違う粒子の同成分は反対符号である”という推論を使うと$m_{1x}m_{2y}$と$m_{1y}m_{2x}$は同符号であると結論される．(何故なら，$m_{1x}m_{2y} = m_{1x}(-m_{1y})$,　$m_{1y}m_{2x} = m_{1y}(-m_{1x})$.)

ところが，量子力学によると

$$(\sigma_{1x}\sigma_{2y} + \sigma_{1y}\sigma_{2x})\psi_{singlet} = 0 \tag{14.11}$$

となり，$m_{1x}m_{2y}$と$m_{1y}m_{2x}$は異符号と結論される．このパラドックスの原因は“違う粒子の同成分は反対符号である”という測定によらない推論を介入させたことに起因する．

次に3体のスピン系を考える．いま

$$\psi_{GHZ} = |0\rangle_1|0\rangle_2|0\rangle_3 - |1\rangle_1 1\rangle_2|1\rangle_3, \text{ GHZ 状態} \tag{14.12}$$

を取ると，次の関係が成り立つ．

$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}\sigma_{3y}\psi_{GHZ} = \sigma_{1y}\sigma_{2x}\sigma_{3y}\psi_{GHZ} = \sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{3x}\psi_{GHZ} = \psi_{GHZ},$$

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{3x}\psi_{GHZ} = -\psi_{GHZ}. \tag{14.13}$$

最初の関係をみると$m_{1x}m_{2y}m_{3y} = m_{1y}m_{2x}m_{3y} = m_{1y}m_{2y}m_{3x} = 1$．三つをかけると$(m_{1x}m_{2y}m_{3y})(m_{1y}m_{2x}m_{3y})(m_{1y}m_{2y}m_{3x}) = m_{1x}m_{2x}m_{3x} = 1$となり，第二の関係式からの結論$m_{1x}m_{2x}m_{3x} = -1$と矛盾する．

オペレータの関係から

$$(\sigma_{1x}\sigma_{2y}\sigma_{3y})(\sigma_{1y}\sigma_{2x}\sigma_{3y})(\sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{3x}) = -\sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{3x} \tag{14.14}$$

であるから，三つのオペレータの測定値の積と，三つのオペレータの積の測定値は違っているのである．三つのオペレータは交換可能でない($\sigma_{2y}\sigma_{2x} = -\sigma_{2x}\sigma_{2y}$)ことに起因する．

これらの考察は物理的実体が各変数の確定値を所持して存在しているのではなく，測定の仕方に依存していることを示している．これらはKocken–Spencher定理（q数の関数の期待値は，各々の期待値をその関数に代入した値と異なる）として一般に証明されている．また，測定のされ方に依存しない変数の物理的実体があるとするとおこる矛盾は，文脈依存性(contextual)と呼ばれている．

14.5 EPRのパラドックス

1935年，アインシュタイン–ポドロフスキー–ローゼン(EPR)は「量子力学による物理的実在の記述は完全か？」という題名の論文を発表した．ここで提起された課題が先述の「隠れた変数仮説」「ベルの不等式」などの議論に引き継がれたのであるが，オリジナルな議論にはエンタングルメント以外に遠隔相関のパラドックスが含まれている．

二つの同種粒子が同じ大きさの運動量で左右に放出されるとする．運動量保存から，重心の位置は静止している．また

$$[\hat{p}_1 + \hat{p}_2, \hat{x}_1 - \hat{x}_2] = [\hat{p}_1, \hat{x}_1] - [\hat{p}_2, \hat{x}_2] = 0 \tag{14.15}$$

であるから，$p_1 + p_2$ と $x_1 - x_2$ は同時に確定値を取り得る．いま位置変数を離散値を取る変数のように考えて状態ベクトルを書けば

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{x_1, x_2} \Psi(x_1, x_2, t)|x_1\rangle|x_2\rangle \\ &= \sum_{x_1 - x_2, x_1 + x_2} \Psi(x_1 - x_2, x_1 + x_2, t)|x_1 - x_2\rangle|x_1 + x_2\rangle. \end{aligned} \tag{14.16}$$

ここで $\hat{x}_1 - \hat{x}_2$ は確定値 $x_0(t)$ を取り，また重心座標 $(\hat{x}_1 + \hat{x}_2)$ は一定であるから

$$(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)|\Psi(t)\rangle = x_0(t)|\Psi(t)\rangle,\ (\hat{x}_1 + \hat{x}_2)|\Psi(t)\rangle = X_0|\Psi(t)\rangle \tag{14.17}$$

という条件を満たす2体系を考えている．

こうして $p_1 + p_2 = 0$ の2体系の波動関数は

$$\Psi(x_1, x_2, t) = C\delta(x_1 - x_2 - x_0(t)) \tag{14.18}$$

の形に書ける．ここでデルタ関数のフーリエ展開による表示 $\delta(x) = (1/2\pi) \times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} dk$ を用いて

$$\begin{aligned} \delta(x_1 - x_2 - x_0(t)) &= A \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-(2\pi i/\hbar)p(x_1 - x_2 - x_0(t))]dp \\ &= \int \psi_1(x_1, p_1, t)\psi_2(x_2, p_2, t)\delta(p_1 + p_2)dp_1 dp_2. \end{aligned} \tag{14.19}$$

ここで

$$\begin{aligned} \psi_1(x_1, p_1, t) &= \sqrt{A}\exp[-(2\pi i/\hbar)p_1(x_1 - x_0(t)/2)], \\ \psi_2(x_2, p_2, t) &= \sqrt{A}\exp[-(2\pi i/\hbar)p_2(x_2 + x_0(t)/2)] \end{aligned} \tag{14.20}$$

は二つの粒子の各々の波動関数である．したがって，2体系の波動関数は次のように書き表される．

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \int \psi_1(x_1, p, t)\psi_2(x_2, -p, t)dp. \tag{14.21}$$

これを $\Psi(x_1, x_2, t) \rightarrow \sum_p \psi_1(x_1, p, t)\psi_2(x_2, -p, t)$ のような形に書き換えると，これまでの離散的な固有値に対するエンタングルメントの議論にのせることができる．すなわち，$x_0(t)$ だけ位置の離れた二つの粒子の状態が $\psi_1(x_1, p, t)\psi_2(x_2, -p, t)$ のようにエンタングルしていて，いろいろの p 状態のエンタングル状態が重なっているのである．このために第一粒子の運動量の測定で $p_1 = p$ なら，第二粒子の運動量は瞬時に $p_2 = -p$ 状態に収縮するのである．

EPR の状況設定に特徴的なことはエンタングルした 2 体が地上と月面のようなマクロに大きな距離離れていてもいいことである．したがって，第一粒子に対する測定というローカルな行為が遠くにある第二粒子の状態まで決めてしまうことが "パラドックス" とされるのである．第一粒子の測定の結果の伝搬が物理的なものなら，相対論によれば光速を越えて伝達できないから時間差が生ずる．しかし，逆に「波動関数の収縮」に相対論的遅延効果を組み込むことができたとすれば，この「時間差」の間では運動量保存が成立しないことになり新たなパラドックスを生ずる．

このオリジナルな EPR では連続変数の運動量でのエンタングルであったので長く核心が不明確であった．1951 年にボームが二状態 2 体系版（例えばスピン 2 体系）に書き換えることでエンタングルメントが核心であることが明らかになった．ベルはアインシュタインの不満を解消するべく "隠れた変数" 説を深く考察し 1962 年にベルの不等式を提案した．そして，アスペ等の実験で「ベル不等式不成立」の判定ができたのは 1982 年であった，

14.6 Q-ビットのテレポテーション (teleportation)

EPR パラドックスの議論が明らかにしたことはエンタングルした複合系の各要素をマクロに大きな距離遠ざけても量子的な相関を維持していることである．このために，一見したところ，瞬時に情報が伝達するような状況が生まれるのである．こうした状況は局所的な現象でエンタングルした状態にある複合系の各要素を遠隔地で共有することによった，新たな情報通信の途が拓けるかも知れないことを示唆している．

ここで "新たな情報通信" としては Q-ビットの移送がある．古典的なビット情報の移送ではなくビット状態の重なり合った状態（これを Q-ビットという）を情報として移送することである．ある物体系の状態を情報として移送するということは，その状態を他の媒体にコピーしてそれを移送することを意味する．ところが，Q-ビットは直接にはコピーできないことが，次のような議論で示される．

いま移送する Q-ビットを $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ とする．この状態にある要素 A を媒体となる要素 B と作用させて A 上の状態 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ を B 上に実現するのがコピーである．コピー前の A と B の複合の状態は $|\psi\rangle_A|S\rangle_B$ であるが，作用後は

$$C[|\psi\rangle_A|S\rangle_B] \to \alpha|0\rangle_A|0\rangle_B + |\beta|1\rangle_A|1\rangle_B. \tag{14.22}$$

しかしこれは A と B がエンタングルした状態であり，$(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)_A(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)_B$ のように B 上に A 上の状態をコピーできない．これを Q-ビットのコピー（転写）不可定理，あるいは no-cloning 定理などと呼ぶ．ところがエンタングルした状態にある要素を共有している状態にあれば，それを利用して Q-ビットのコピーが可能になる．これが Q-ビットのテレポテーション (teleportation) である．

A(Alice) と B(Bob) がシングレット状態を共有している．これを使って A から B に Q-ビット $|\psi_{Qb}\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ を移送する．A のもとでシングレット状態と Q-ビット状態を $|\Phi\rangle = |\psi\rangle|\psi_s\rangle$ のように合体させる．この状態は次のように A 側の下記の四つのベル状態で展開できる．

$$\begin{aligned}
&(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)_A \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|1\rangle_B - |1\rangle_A|0\rangle_B) \\
&= \Psi_1(\alpha|1\rangle_B - \beta|0\rangle_B) + \Psi_2(\alpha|1\rangle_B + \beta|0\rangle_B) \\
&\quad + \Psi_3(-\alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B) + \Psi_4(-\alpha|0\rangle_B - \beta|1\rangle_B).
\end{aligned} \tag{14.23}$$

ここで Ψ_i は次のように定義されたベル状態である．

$$\begin{aligned}
&\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle), \quad \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle - |1\rangle|1\rangle), \\
&\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle), \quad \Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle).
\end{aligned} \tag{14.24}$$

これらは互いに直交したエンタングルした状態である．Ψ_4 はシングレット状態だが，他は合成スピンの固有状態とは一致していない．

ここまでの手順を含めてテレポテーションの全手順は次のようになる．

(1) A において A と B が共有する Ψ_4 状態と移送する Q-ビット状態を接触させる．
(2) A がベル状態を測定する．ここで四つの重なった状態の何れか一つに収縮する．
(3) 測定結果（ベル状態の番号 $n = 1, 2, 3, 4$）を古典的通信で B に伝える．
(4) B は伝えられた n に応じて，次の操作を施す：$U_1 = i\sigma_y$, $U_2 = \sigma_x$, $U_3 = -\sigma_z$, $U_4 = -1$.
(5) B の状態が A のもとでの Q-ビット状態になる．

(4) の操作例：

$$n = 1 \text{ なら } \; U_1(\alpha|1\rangle_B - \beta|0\rangle_B) = \alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B,$$

$$n=2\text{ なら}\quad \sigma_x(\alpha|1\rangle_B+\beta|0\rangle_B)=(\alpha|0\rangle_B+\beta|1\rangle_B),$$
$$n=3\text{ なら}\quad -\sigma_z(-\alpha|0\rangle_B+\beta|1\rangle_B)=(\alpha|0\rangle_B+\beta|1\rangle_B),$$
$$n=4\text{ なら}\quad -1(-\alpha|0\rangle_B-\beta|1\rangle_B)=(\alpha|0\rangle_B+\beta|1\rangle_B). \tag{14.25}$$

なおベル状態の測定には $P=\sigma_z\sigma_z^A$, $Q=\sigma_x\sigma_x^A$ なる変数の固有状態 $(P,\ Q)=(+1,+1),\ (+1,-1),\ (-1,+1),\ (-1,-1)$ を測定すればよい．

このようなテレポテーションの方式は1993年に Benett *et al.* により提案され，1993年にはレーザー実験により実験室規模で成功し，1997年には約20km離れた実験で実証され，その後の2012年には143kmの距離にまで達した．

14.7 ニュートリノ振動

発生地点から百km〜数万kmもの距離を飛行するニュートリノができる．この実験は量子力学の重なった状態を実感させてくれる好例である．ニュートリノには電子 (e) ニュートリノ，ミュー (μ) ニュートリノ，タウ (τ) ニュートリノの三種類がある．ところが，これら種類状態は質量の固有状態ではないのである．すなわち，決まった質量を持って e,μ,τ ニュートリノが存在しているのではない．

いま簡単のために二種類のニュートリノのみを考えると

$$\begin{pmatrix} |m_1\rangle \\ |m_2\rangle \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} |e\rangle \\ |\mu\rangle \end{pmatrix} \tag{14.26}$$

のように，質量の固有状態は二種類のニュートリノの重なり合った状態なのである．一方，ニュートリノの生成は種類の固有状態でなされるから，例えば μ ニュートリノが生成されたとする．すなわち $|\psi(t=0)\rangle=|\mu\rangle=-\sin\theta|m_1\rangle+\cos\theta|m_2\rangle$．この状態の時間発展はエネルギーで決まるが，ニュートリノの質量は小さいため超相対論の近似ができて

$$A_i=\sqrt{m_i^2c^4+p^2c^2}\sim pc+\frac{1}{2}\frac{m_i^2c^3}{p}. \tag{14.27}$$

これらを用いると時間発展は

$$|\psi(t)\rangle=-\sin\theta\exp[iA_1t]|m_1\rangle+\cos\theta\exp[iA_2t]|m_2\rangle. \tag{14.28}$$

したがって t 時間後に e ニュートリノが測定される確率は

$$P(e)=\langle\psi(t)||e\rangle\langle e||\psi(t)\rangle=\cos^2\theta\sin^2\theta[1-\cos(A_1-A_2)t] \tag{14.29}$$

と計算される．ここで $A_1-A_2=\frac{(m_1^2-m_2^2)c^3}{2p\hbar}$．また $\sin^2\theta\cos^2\theta=\sin^2\theta(1-\sin^2\theta)\leq 1/4$ だから，$0\leq P(e)\leq[1-\cos(A_1-A_2)t]/2$ となる．

14.8 マッハ–ツェンダー干渉計での遅延選択実験

二重スリット実験での干渉縞の存否は「どちらのスリットを通過したか？」を調べる設定の実験のデータか否かで決まっていることをみた．あたかも測定の意図を読み取って現象が起こっているようである．すなわち測定「される側」が測定「する側」を観測しているような構図になる．こう考えると「される側」を欺くことはできないかという発想になる．

ホイラーは測定の意図を現象のスタート以後に決めるという「遅延選択 (delayed-choice) 実験」を提案した．この種の実験がマッハ–ツェンダー型干渉計を使って行われている．実験では光子を一個ずつ入射する．一個の光子の経路が半透明鏡のビームスプリッター BS_1 で二手に分かれるが最後の出口でもう一度半透明鏡 BS_2 を通すと "どっちの経路" の情報はなくなる．このために

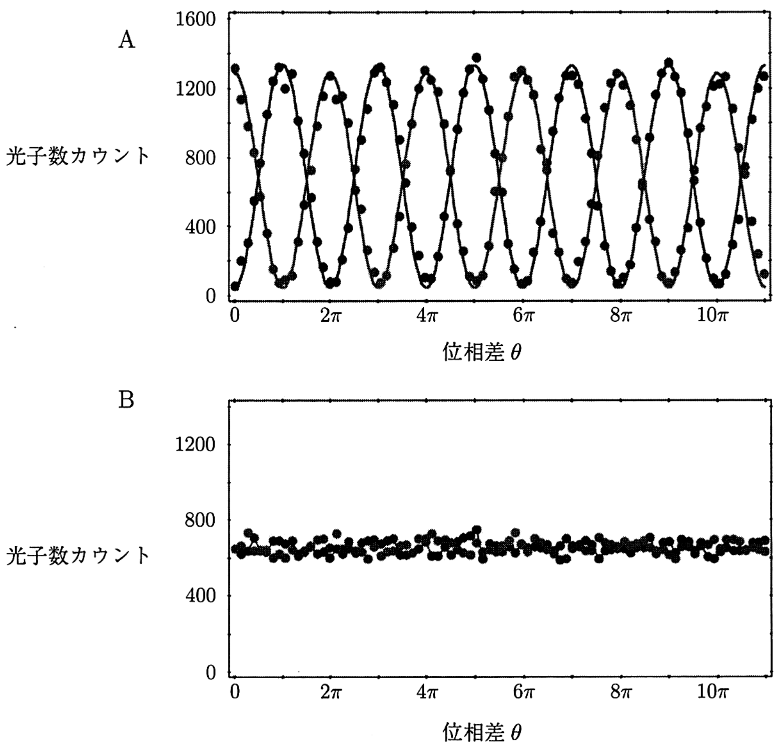


図 14.5 図 13.1 のように，一個の光子の経路がビームスプリッター BS_{input} で二手に分けられ，経路 1 または経路 2 を通過した後で検出される．経路 1，経路 2 の長さは 48m．経路 1 に位相変化の装置を挿入し，これによるさまざまな位相差に対応した実験結果が示されている．BS_{output} を挿入した検出結果 A では位相差に応じた干渉縞が観測される．BS_{output} を挿入しない場合は位相差に関わらず両経路の通過がほぼ等確率であることを示すだけである．(V. Jacques *et al.*, Science, 315, 966–968 (2007) より.)

先述のように干渉計の片方のパスに位相変換器をつけて測定すれば，位相差に対する干渉縞が見られる．ところが出口の BS_2 を取り除けばこの測定装置は "どの経路か？" を決める測定装置に変わる．したがって相互の位相差とは無関係に BS_1 での分岐の確率に従ったヒット数を示す．

遅延選択とは BS_1 を通過後の BS_2 の地点に到達する直前にまで BS_2 を置くかどうか決めないことである．技術の進歩でこうした短い時間を制御する遅延選択が可能になっている．実験の結果によれば，光子のスタート前から決めている事前選択だろうが，遅延選択だろうが，結果は変わらず，BS_2 の有無がヒットデータの性質を決めていることが確かめられた．決して測定「される側」が「する側」を観測して対応を変えているわけではない．

14.9 量子ゼノン効果

古代ギリシャに発するゼノンのパラドックスとは，俊足のアキレスが遅速の亀を追い越そうと思っても追い越せないという次のような論法を指す．すなわち，もと居った亀の位置までアキレスが達する時間の間にも亀は必ず先に移動するから，それを無限回繰り返しても，差が無限に縮まるだけで，決してアキレスが亀の前に出ることはないという論法である．このパラドックスは「無限回」の操作には必ず無限に長い時間がかかってしまうという錯覚を利用したもので，ここでいう無限回に要する時間は有限であることを簡単に示せる．ただしこの「ゼノン」の名を冠した量子ゼノン効果で論じるのは「追い越し」ではない．

コペンハーゲン解釈によると，系が何れの状態にあるかを測定すればある一つの状態に収縮する．すなわち，重なった状態 $\psi(t) = \alpha(t)|0\rangle + \beta(t)|1\rangle$ は $|0\rangle$ か $|1\rangle$ の何れかに収縮する．いま，$t = 0$ で系は励起状態 $|1\rangle$ にあったとする．t 時間後に測定した際に励起状態が測定される確率 $P_1(t)$ は 1 より小さくなっていくが，測定すればまた $|1\rangle$ に戻る．いま時間 T の間に N 回測定を繰り返すとする．N が十分大きければ殆どの測定で $|1\rangle$ 状態に戻されるから，N を大きくすれば状態は何時までも $|1\rangle$ に止まり続けると想像される．「ゼノン」的に $N \to \infty$ を考えると $P_1(T) \to 1$ となるのであろうか？

しかし無限回を論ずる場合には注意を要する．$P_1(\Delta t) \sim P_1(0) + (dP_1/dt)_{t=0}\Delta t + \cdots$ のようにテイラー展開で考えると，$(dP_1/dt)_{t=0}$ が 0 でなければ，$\tau = 1/(dP_1/dt)_{t=0}$ と置いて，

$$P_1(T) = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{1}{\tau}\frac{T}{N}\right)^N = e^{-T/\tau} \tag{14.30}$$

のように確率は 1 には止まってはいない．

ただしこの議論では $(dP_1/dt)_{t=0} \neq 0$ としているが，これが成立しない場合がある．二つのエネルギー準位の差の放射を入射して Rabi 振動を起こしている状態では，$P_1(t) = (1 + \cos\Omega_R t)/2$ のように変化するからテイラー展開は

$P_1(T/N) \sim 1 - (1/4)(\Omega_R T/N)^2 \cdots$ だから，

$$P_1(T) = \lim_{N\to\infty} \left(1 - \frac{1}{4}\left(\frac{\Omega_R T}{N}\right)^2\right)^N = e^{-(\Omega_R T)^2/(4N)}. \qquad (14.31)$$

したがって，$N \to \infty$ で $P_1(T) \to 1$ である．すなわち小刻みに測定し続けている，言い換えれば，絶えず監視し続けていると，元の状態から他の状態に遷移しにくくなるのである．この意味で「番犬 (watch-dog) 効果」と呼ぶ場合もある．

この効果は実験で確かめられている．1990 年のワインランドの実験では 5000 個の B^{9+} イオンを用いる．この原子の $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の他にもう一つの準位 $|2\rangle$ が使われる．磁場をかけて分離した $|0\rangle$ と $|1\rangle$ のエネルギー差は電波振動数域の 320.7MHz だが，$|0\rangle$ と $|2\rangle$ のエネルギー差は波長 313nm のレーザー光である．もし原子が $|0\rangle$ 状態にあればこのレーザー光を照射すると共鳴散乱が起こる．すなわち，共鳴散乱が起こったかどうかで $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の何れであるかの判定ができるのである．$T = 100$ms, $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ の実験を行って理論どおりの結果が得られている．

14.10 「シュレディンガーの猫」実験，など

近年は「シュレディンガーの猫」を実現した実験などというように「シュレディンガーの猫」は学術用語となっている．この際の「猫」とはマクロな存在という意味である．マクロに区別できる程の大きさを持つ現象の異なった状態が量子的に重なった状態を実現することを指している．そのような存在として QED キャビティー，ジョセフション結合，棒の基底振動，シュテルン–ゲルラッハ実験のビーム軌道，などがある，

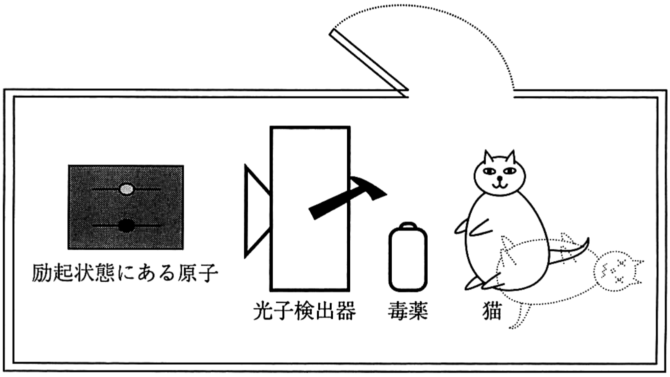


図 14.6　シュレディンガーの猫．オリジナルな設定では量子系は放射性核であるが，「放射線による猫の死」と紛らわしく誤解を生むので，ここでは量子系は「励起状態にある原子」にしてある．LED などの発光デバイスもこういう量子系の集団である．

コラム 10　EPR 論文の引用回数

1935 年に発表されたアインシュタインの量子力学批判の論文「物理的実在の量子力学による記述は完全と考えられるか？」(Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?) は共著者 Einstein–Podolsky–Rosen の頭文字を取って EPR 論文と呼ばれている．アインシュタインの米国亡命後に書かれたもので，三人の議論をもとにポドロフスキー (1896–1966) が執筆したと言われている．Physical Review 誌に発表され，ポドロフスキーが NY タイムズ紙に「量子力学の誤りが明らかになった」と売り込んでそれが新聞に載った．アインシュタインはそれに立腹して彼とは絶交にしたが，若いローゼン (1909–1995) とは一般相対論でその後も共同研究した．

この論文をやはり亡命先のロンドンで読んだシュレディンガーがアインシュタインの量子力学批判に共鳴して「シュレディンガーの猫」を含む議論を書いたのである，この時の二人の往復書簡をテーマにした本がファイン著「シェイキー・ゲーム」（町田茂訳，丸善，1992 年）である．

大物学者の批判論文ではあったが当時はシュレディンガーとボーアが反応したぐらいで，一般の研究者が取り上げることは全くなかった．下の図はこの EPR 論文の年間当たりの引用回数の経年変化をグラフにしたものである．引用回数とは他の論文に引用された回数をあらわし，影響力のバロメータとされている．EPR 論文は当初無視されたが 1970 年以後から急激に注目されたことが分かる．30 年以上経って影響が増したのである．

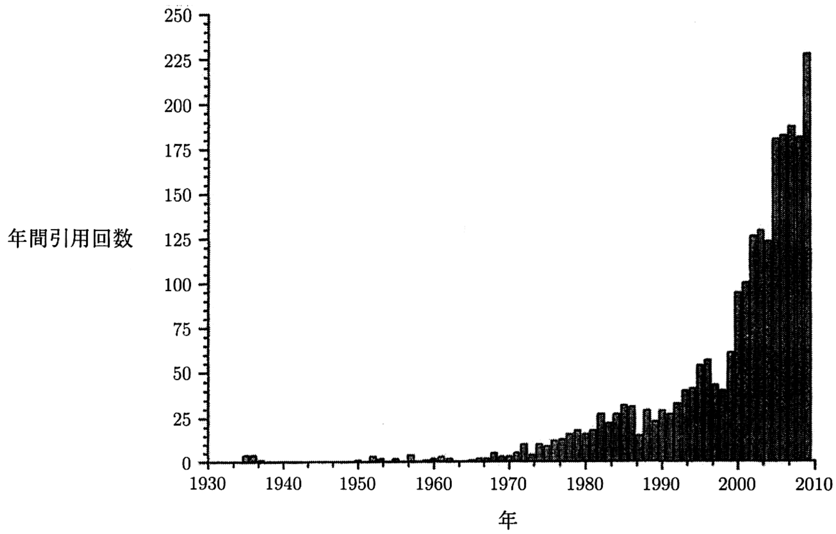


図 14.7　EPR 論文引用回数の経年変化.

コラム 11　「波動関数の制御」の簡単な例

無限に高い壁に挟まれた幅 L の空間で粒子が基底状態にあったとする．波動関数の初期状態は図上段右図のように一つ山である．この空間の真ん中にポテンシャルの壁を時間に比例して高くしていく．壁の厚さが中心に「対称なポテンシャル壁」なら図中段右図のように時間の経過とともに波動関数は二つの山になる．ところが，図上段左図のように左右「非対称なポテンシャル壁」を高くしていくと図中段左図のように波動関数は左側の一つ山になる．図下段は $V(t) = 300$ での各々の波動関数である．この図は無次元化した次のシュレディンガー方程式を数値積分したものである．

$$i\frac{\partial}{\partial\tau}\Psi(\xi,\tau) = \left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + V(\xi,\tau)\right)\Psi(\xi,\tau).$$

$-\epsilon \leq \xi \leq \epsilon + \delta$ で $V = \gamma\tau$, 他の ξ で 0, $\xi = \frac{x}{L}$, $\tau = (\frac{E_0}{\hbar})t$, $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{(2mL^2)}$.

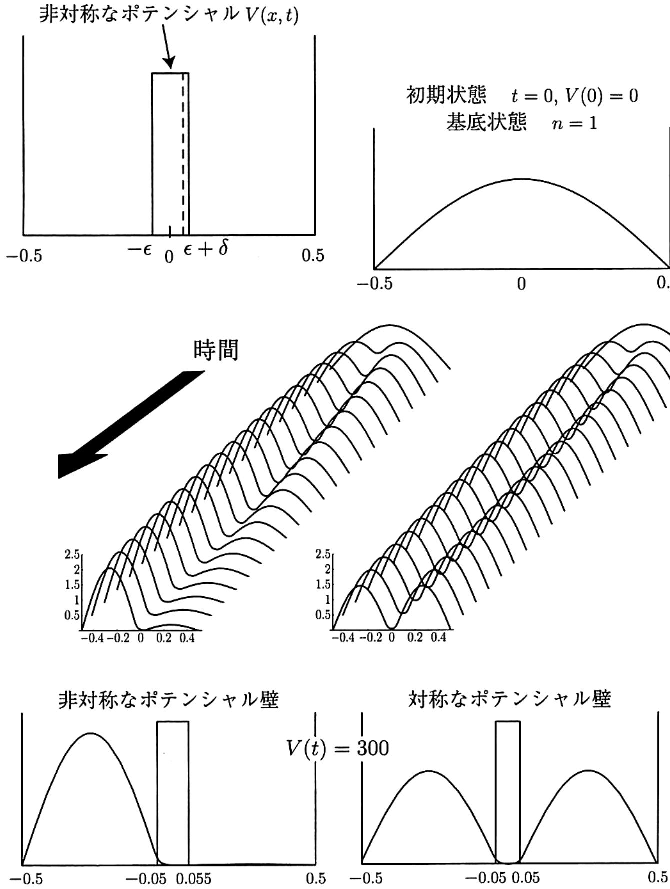


図 14.8　$\epsilon = 0.05, \delta = 0.005, \gamma = 2$. 図は志智 亘「甲南大学修士論文（2004 年）」より転載.

第 15 章
量子情報技術へ

量子コンピュータ，量子暗号，量子通信といった量子情報技術が今世紀には花開くと言われている．近年，この課題の研究開発は急展開しており，ハードウエアとソフトウエアの両面で，将来どのようなかたちで実現するのかの具体的な姿はまだ見えていない．本書で学んだ量子力学がどのようなかたちで関与していくかの一端に触れておく．

15.1 量子コンピュータ

量子コンピュータでは一つの物理的な操作でアヴォガドロ数(10^{26})にも及ぶ膨大な数の状態を並列計算的に一気に変化させることができるようになると考えられている．このためにコンピュータの演算速度は飛躍的に高まると期待されているのである．この根拠と挙げられるのが二状態の物理的要素が Q-ビット状態にあることである．例えば，n 個の物理的要素が $\psi_I = |0\rangle_1 |0\rangle_2 \cdots |0\rangle_n$ あるとしてこれらの n 個の系に一定時間マイクロ波を照射すると Rabi 振動によって各状態を一斉に $|0\rangle_i \to (|0\rangle_i + |1\rangle_i)/\sqrt{2}$ のように変化させることができる．すると状態はユニタリー変換 $U(\Delta t)$ で $\psi_A = U(\Delta t)\psi_I$ のような変換を受けて

$$\psi_A = \frac{|0\rangle_1 + |1\rangle_1}{\sqrt{2}} \frac{|0\rangle_2 + |1\rangle_2}{\sqrt{2}} \cdots \frac{|0\rangle_n + |1\rangle_n}{\sqrt{2}} \tag{15.1}$$

に変化する．これを展開すれば 2^n 個の $|a_1\rangle_1 |a_2\rangle_2 \cdots |a_n\rangle_n$ のような項の和になる．ここで a_i は 0 また 1 である．すなわち ψ_A は 2^n 個の状態が重なり合ったエンタングル状態である．

ここで 2^n という数字に注目すると，$2^2 = 4, 2^3 = 8, \cdots, 2^{10} = 1024, \cdots, 2^{100} \sim 10^{30}$ のように n とともに急激に増加する．たった $n = 100$ 個の要素（原子，電子，光子，量子ドットなど）で重なっている状態の数はアボガドロ数以上になるのである．しかもこの膨大な状態を一気に変化させるこ

とができるのであるから，演算速度が飛躍的に増加するのである．現在はnが10程度であるが，実際には何十個もの要素の系を可干渉性を持つように維持することが難しく，マイクロ秒といった短時間に計算を終える必要がある．

15.1.1 CNOT：量子回路の素子

デジタル情報の処理とはNOT（否定），AND（積），OR（和）などの論理操作の組み合わせで処理することである．これらの操作はNOT以外は可逆でく，非可逆な論理である操作，すなわち，出力から入力が一義的に決まらない．論理操作を行う素子を論理ゲートと呼ぶ．素子が何回も同じ機能を発揮するためには，素子の使用後に，毎回，素子の状態を標準状態に戻しておく必要があり，これを消去 (erasure) と呼ばれる操作である．この情報を環境に捨てる操作は物理的には素子以外の物理的な自由度の励起を意味しており，これは発熱として現象化する．1ビットの消去には$\Delta S = k \ln 2$のエントロピー増加を伴う．

一方，量子計算で目指されている計算上の処理は重なったままの状態を変化させる変換は可逆なユニタリー変換である．すなわち可逆な論理操作に対応した量子回路が素子となるのである．この典型がCNOTゲートである．古典ビットを用いるコンピュータと違って，発熱なしに操作が進行する．

CNOTゲートはコントロールC(control)のラインとターゲットT(target)のラインという最低二つの要素から成る．その動作は

1. Cがoff（0状態）ならTをそのまま，
2. Cがon（1状態）ならTを変える（否定NOT）

である．これを数式で表現すれば，$a, b = 0$または1として，

$$|a\rangle_C |b\rangle_T \to |a\rangle_C |a \oplus b\rangle_T, \quad U_{\mathrm{CNOT}}|a, b\rangle = |a, a \oplus b\rangle \tag{15.2}$$

である．$\oplus$は和を2で割った余りの意味である．mod(2)の和ともいう．

$b = 0$の場合はコピーだが，入力がQ-ビットなら，次のようにエンタングル状態へ変換される．

$$(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|0\rangle \to \alpha|0\rangle|0\rangle + \beta|0\rangle|1\rangle. \tag{15.3}$$

CNOTをユニタリー変換のオペレータで書けば$U_{\mathrm{CNOT}} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x$となる．$\sigma_x$はNOTのオペレータである．例えば$U_{\mathrm{CNOT}}|1\rangle|1\rangle = |1\rangle\sigma_x|1\rangle = |1\rangle|0\rangle$である．

15.1.2 積状態の1列行列による表示

ユニタリー変換を行列で表現するには$(y_0|0\rangle + y_1|1\rangle)(z_0|0\rangle + z_1|1\rangle)$のような積状態を1列行列で書く必要がある．それには次のような置き換えを行う．

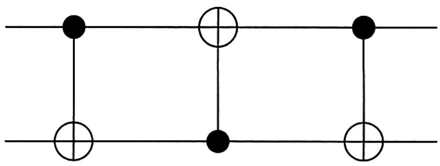


図 15.1　三つの CNOT ゲートによる SWAP ゲート．操作は右から左に流れる．黒丸側をコントロールとして十字丸側で NOT の操作をするのが一つの CNOT ゲートである．図のように CNOT ゲートを三つ繋ぐと SWAP 操作が実現する．

$$(y_0|0\rangle + y_1|1\rangle)(z_0|0\rangle + z_1|1\rangle) \to \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_0 \\ z_1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} y_0 z_0 \\ y_0 z_1 \\ y_1 z_0 \\ y_1 z_1 \end{pmatrix}. \tag{15.4}$$

CNOT ゲート

この表現を用いると，CNOT ゲートは次のようになる．y_0, y_1 を C にとれば

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 z_0 \\ y_0 z_1 \\ y_1 z_0 \\ y_1 z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 z_0 \\ y_0 z_1 \\ y_1 z_1 \\ y_1 z_0 \end{pmatrix},$$

z_0, z_1 を C にとれば

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 z_0 \\ y_0 z_1 \\ y_1 z_0 \\ y_1 z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 z_0 \\ y_1 z_1 \\ y_1 z_0 \\ y_0 z_1 \end{pmatrix}.$$

SWAP ゲート

次に

$$(y_0|0\rangle + y_1|1\rangle)_A(z_0|0\rangle + z_1|1\rangle)_B \to (z_0|0\rangle + z_1|1\rangle)_A(y_0|0\rangle + y_1|1\rangle)_B$$

という交換 (SWAP) ゲートを考えてみる．A 粒子上の状態と B 粒子上の状態を入れ替えるという操作である．これは次のように三つの CNOT ゲートを続けて作用させることによって得られる．

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

15.1.3 Rabi 振動を用いた CNOT の状態操作の例

原子の電子状態 $|a\rangle_e$ と hyperfine 状態 $|b\rangle_h$ の積状態 $|b\rangle_h|a\rangle_e$.

エネルギーレベルは下から $|0\rangle|0\rangle$, $|1\rangle|0\rangle$, $|0\rangle|1\rangle$, $|1\rangle|1\rangle$.

第一段階

電子状態遷移の振動数での Rabi 振動：

$|\phi(0)\rangle_e = |0\rangle_e$ の場合, $|\phi(t)\rangle_e = \cos\lambda t|0\rangle_e + \sin\lambda t|1\rangle_e$, $|\phi(\lambda t = \pi/4)\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle_e + |1\rangle_e)$. $|\phi(0)\rangle_e = |1\rangle_e$ の場合, $|\phi(t)\rangle_e = -\sin\lambda t|0\rangle_e + \cos\lambda t|1\rangle_e$, $|\phi(\lambda t = \pi/4)\rangle = 1/\sqrt{2}(-|0\rangle_e + |1\rangle_e)$.

$|1\rangle|0\rangle \to |1\rangle(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, $|1\rangle|1\rangle \to |1\rangle(-|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$.

第二段階

補助レベルを用いた Rabi 振動（$\lambda' t = \pi$ パルス）で $|1\rangle_e$ の符号を変える.

$|1\rangle(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2} \to |1\rangle(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2} \to -|1\rangle(-|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$.

$|1\rangle(-|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2} \to |1\rangle(-|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2} \to -|1\rangle(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$.

第三段階

第一段階の逆をやる．その結果は

$|1\rangle|0\rangle \to -|1\rangle|1\rangle$, $|1\rangle|1\rangle \to -|1\rangle|0\rangle$.

$|0\rangle|0\rangle$, $|0\rangle|1\rangle$ は Rabi 振動に反応しないから，T の変更はない．故に CNOT.

二個の量子ドットの二レベルの積状態

電場をかけた状態での $|1\rangle|0\rangle$ と $|1\rangle|1\rangle$ の間に $\pi/2$ パルスの Rabi 振動をさせて，各々を $|1\rangle|1\rangle$ と $|1\rangle|0\rangle$ に変えると CNOT になる.

15.2 量子暗号

かつて暗号といえば軍事や外交などの特殊な場面の課題であったが，ネットワークによる情報通信が社会インフラになる中で暗号技術には新たな役割が増している．インターネットの普及もこういう暗号技術に支えられている．こうした中で量子力学は次の二つの面で大きなインパクトを与えるものと考えられている.

1. 従来の暗号手法を破る量子計算.
2. 盗聴者が分かる量子暗号システム.

15.2.1 シーザー鍵方式から公開鍵方式へ

従来，暗号を用いて情報を伝えるにはシーザー方式と呼ばれる次のような手

順をふむ．まず伝達すべき内容を記した文字列としての平文P(plain text) がある．次にこの文字列を鍵 K(key) を用いて暗号文 C(cipher) に変換する．P から C への変換とは例えばアルファベットで書かれたP の各文字をアルファベット表で数字K だけずらした文字に置き換えてC を作ることである．発信者 A(Alice) がP から K で C を作り，C を受信者 B(Bob) に送る．A と B は K を事前に共有しているので，B は受け取った C を K を使って P に戻すのである．A から B に移送されるのは C であるから，盗聴者 (eaveser)E(Eve) が C を手にしても K を所持していなければP の秘密は保たれる．すなわち，通信の安全性は E に K を入手させないことで維持されるのである．

しかしこの方式にはいくつかの弱点がある．P が日常言語なら使用される言語の性格から単語や文字の出現や結合の確率が決まっており，E はこの統計的法則性を用いて C から P を有限の手続きで推定できる．同じ K での幾つものC を盗聴すれば推定は容易になる．K の可能性が有限であればコンピュータでの高速処理が可能になった時代では全ての場合をチェックできるのである．この欠点をカバーするにはまず日常言語の P をデジタルコード化 (encode) したのちに，デジタルの乱数の K を移送の度毎に決めて C に変換する one-pad 方式である．デジタル・ネットワーク通信時代に合った手法である．しかし，即時的に K を安全に共有することが新たな課題になる．そこで K の移送を避けるために往復方式も行われている．ここでは A と B が別々の K を所持し，A の K_A で C を作って B に移送し，B がさらに K_B，A に戻して K_A を解き，それを B に移送して K_B の鍵を解く．この方式であっても E は移送される三種類の C から原理的には P が推定できる．要するに，K による変換が可逆的な変換であれば解の一義性から盗聴は可能なのである．

one-pad 方式のこの欠点を補うものが公開鍵方式RSA 方式である．原理的には可逆な変換であっても処理に要する時間の長さが違うために実際上は一方通行となるような変換を使うのである．こうした変換として利用されているのが巨大素数の因数分解である．ある巨大な素数（2，3 百桁）p と q から $N = pq$ を計算するのは簡単だが，N から p, q を出すには長い時間かかる．すなわち実際上一方通行であり実際上は可逆ではない．ある巨大素数を知っていると導出できる二つの整数 e と d がある．A は B に $(N,\ e)$ と C を送る．B は $(N,\ e)$ から計算される d を使って C から P を再現する．p を知らない E は公開鍵 $(N,\ e)$ と C を手にしても再現できない．N から p を出す計算に要する時間が現代のコンピュータでは宇宙時間的に長くなり，現実には不可能である．

現在，広く使用されている暗号方式の安全性はこのように因数分解の計算をする計算機が存在しないことで支えられているのである．N から p を簡単に計算できればこの方式は崩壊する．ところが，1995 年，ショア (Peter Shor) は量子計算機ができれば，この計算が量子アルゴリズムで短時間に計算可能になることを示した．これが量子コンピュータへの世間の関心を高めることとなった．

15.2.2 量子鍵配布：BB84 方式，Ekert 方式

量子力学に特有な性質を用いて安全な暗号システムを作る試みもある．量子的信号の移送で，安全に K を共有しようとするものである.「量子的信号」の特性として次のようなことがある．例えば，光の偏りを二状態として使う場合，方向を鉛直–水平の二つにとる場合 + とそれに 45 度傾いた方向にとる場合 × の選択肢がある．量子力学に特有なことは + 方式を × 方式で測定しても確率的にある結果を返すから盗聴者は誤った情報を得てもそれを知ることができない．また盗聴者が盗聴したことを悟られないようにするには，盗聴者の測定値と同じものを受信者に向けて発信することになるが，それは一般には発信者のものと同じでなくエラーが発生することを意味し，またこのことで盗聴の事実を送受信者に暴露してしまうことになる．

こうした方式の違いによる測定値から正しい値の確率的推測が受信者にも盗聴者にも必要になる．送るべき同じ情報を多数回送ることは容易なことであるから，こうした多数回のデータから，盗聴者よりも高い確率で，受信者が正しい情報を得られるように工夫することになる．一回だけの確定的な伝達でなく，多数回データからの確率的推論が必要になるのである．

コラム12 ファインマンと量子コンピュータ

アインシュタイン (1879–1955) に並ぶ物理学のアイコンの一人はファインマン (1918–1988) である．ノーベル賞の対象となった量子電磁気学の業績だけでなく，魅力的な講義者，自由な社会的ふるまい，チャレンジャー事故調査委員などの行動派，など話題の絶えない人物であった．それらは多くの本でひろく共有されている．岩波現代文庫（岩波書店）だけでも次のようなものがある．

1. 「ご冗談でしょう，ファインマンさん」，
2. 「困ります，ファインマンさん」，
3. 「聞かせてよ，ファインマンさん」，
4. 「科学は不確かだ！」，
5. 「光と物質のふしぎな理論ー私の量子電磁力学」，
6. 「物理法則はいかにして発見されたか」．

この岩波現代文庫にはさらに次のような本もある．

- サイクス著「ファインマンさんは超天才」，
- レイトン著「ファインマンさん最後の冒険」．

ファインマンはさらに「ナノテクの父」,「量子コンピュータの父」と呼ばれるように新しい学問分野の創造を予言した人物としても讃えられている．ナノテクは「底のほうにはまだ十二分の余地がある」(1959 年)，量子コンピュータは「未来の計算機」(1985 年）といった講演記録（何れも前掲本 3 に掲載）に述べられている．ナノテクの問題意識もふくめて彼が情報科学に興味を持っていたことが分かる．

1980 年代，カリフォルニア工科大学の学部学生用の情報科学の講義に彼は挑戦している，半年続く本格的な講義であり，数年続けた．病気で急逝する晩年，彼はその講義録の出版準備に取りかかるが生存中には完成せず，託された教え子によって刊行されたのが次の本である．

Richard P. Feynman, “Feynman Lectures on Computation”, edited by Tony Hey and Robin W. Allen, Westview, 1996.

Hey は託された「教え子」で，英国からファインマンのもとにかつて留学して素粒子で Ph.D を取った人だが，編纂当時は英国で情報科学の教授をしている．ファインマン・レクチャーというと物理学入門としてあまりにも有名だが，彼は二番手に情報科学のレクチャーに挑戦したのである．学部学生用の授業であるから定番の情報の講義からあまり外れられないが，物理学者ファインマン独特の「情報」の理解も読むことができる．付録に量子計算に述べた原稿もついている．ファインマン・ファンには一見の価値のある本である．彼はけっして物理学だけの神様ではないのである．

あとがき

2001年に京都大学を退職して甲南大学にお世話になった．大学院講義として宇宙物理学というのを依頼されたが，ある時から同じ名称で，状態ベクトル表記やパウリ行列演算の訓練になるような量子力学の講義を始めた．その内に，宇宙物理学の講義をやる人が別にできたので，私の講義は量子力学特論Aと改名されそのまま続けた．この講義の配布資料用にTeXで数式をたくさん打ち込んだので，その有効利用を考えたのが本書の発端である．

一般相対論や宇宙物理学の専門家なのに「何故，量子力学か？」という問いへの答えは「もの書き物理学者」として下記のような拙著にたっぷり書いてある．

- 「量子力学のイデオロギー」，青土社，1997年，2011年．
- 「孤独になったアインシュタイン」第一部，岩波書店，2004年．
- 「アインシュタインの反乱と量子コンピュータ」，京都大学学術出版会，2009年．
- 「量子力学は世界を記述できるか」，青土社，2011年．
- 「科学と人間」第三章，青土社，2013年．

簡潔に「答え」を述べれば，(イ）量子力学は物理学の一般理論であり研究の専門と関係ない，(ロ）量子技術の進展でかつての論争を新しい視点で見られる時期になった，などの一般的なものの他に次の個人的な事情（ハ）もある．1960年代ブラックホールの命名者で一般相対論的宇宙物理をリードしたホイラー (J. Wheeler) の追っかけであったので，彼が1970年代後半から量子力学一辺倒に転じた様子が気になったことである．この「後期ホイラー」のスクールから巣立った一人が量子計算で名を馳せるドイチェである．

最近，量子力学の言葉や概念はバイオ系を含む広範囲な専門家の世界に登場するようになった．それは普及が著しいハイテク測定機器の動作を理解するのに必要な用語の背後に量子力学が控えているからである．その意味で量子力学は物理や化学の囲いから飛び出した時代に入ってきた．こうなると「使う」側から見て十分なのに，「これが何か」に悩む人が浮いて見えてくる．この「気配」をどう読むかという問題は端的にいうと，数理ツールと実在の関係についての常識が物理学においてやや特殊なのではないかという点に至る．

この点でも量子力学特有の数理ツールは物理学者にはよいレッスンである．「情報科学は数理ツールだ」という言い方には抵抗を感じないが，「量子力学は数理ツールだ」には承服できないという人が多いかも知れない．「数理ツールで書かれた自然の法則だ！」と．筆者が上記の様な一般書の形で論じているテーマはまさにこの周辺をめぐる逡巡である．

量子力学を「使い込む」にせよ，「何物であるかを考える」にせよ，この数理ツールを縦横に使いこなせなければ始まらない．本書はこの数理ツールで「イメージする」「推論する」「考える」「実感する」ことの訓練に役立つことを目的とする．よく「直感的に理解できて初めて実感できる」ことを夢見る人がいるが量子力学はそれを拒絶している．数理ツールに習熟することでそれを実感を伴う新たな直感に仕立て上げる訓練が必要なのである．それが「自然をありのままに見ない」修行の一つであり，玄人への途なのだと悟るべきだろう．

2013年9月　　　佐藤文隆

索　　引

欧字

ア

カ

サ

タ

ナ

ハ

マ

ヤ

ラ

著者略歴

佐藤 文隆
さとう ふみたか

1938 年　山形県生まれ
1960 年　京都大学理学部卒業
1964 年　京都大学大学院理学研究科中退
1964 年　京都大学理学部助手，講師 (1970-71)
1966 年　理学博士
1971 年　京都大学基礎物理学研究所助教授
1974 年　同研究所教授，所長 (1976-80)
1985 年　京都大学理学部教授，学部長 (1993-95)
2001 年　甲南大学理工学部教授 (-2006)
現在　甲南大学特別客員教授，京都大学名誉教授
専門　理論物理学，一般相対論，宇宙物理学
著書　「相対論と宇宙論」（サイエンス社，1981）
「アインシュタインの反乱と量子コンピュータ」（京都大学学術出版会，2009）
他多数.

臨時別冊・数理科学 SGC ライブラリ - 102
『量子力学ノート　数理と量子技術』

著　者　佐藤 文隆

2013 年12月25日　　初版発行

数　理　科　学　編　集　部　　　　発行人　木　下　敏　孝
TEL.(03)5474–8816
FAX.(03)5474–8817

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp
ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp まで.　　　表紙デザイン：長谷部貴志

発行所　©　株式会社　サ　イ　エ　ン　ス　社　　TEL.(03)5474–8500(代表)
〒 151–0051　東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03)5474–8600(広告部)

組版　(株) ゼロメガ
印刷　(株) シナノ　中澤 眞
製本　(株) 関川製本所　関川安博